



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



Αμαλία Κοντογιάννη

ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗ
ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΜΕΡΙΚΩΝ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΙΣΩΣΕΩΝ
ΕΛΛΕΙΠΤΙΚΟΥ ΤΥΠΟΥ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Ιωάννινα, 2017

Αφιερώνεται σε όλα τα αγαπημένα πρόσωπα στη ζωή μου

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στα Εφαρμοσμένα Μαθηματικά και Πληροφορική που απονέμει το Τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε την 19/12/2017 από την εξεταστική επιτροπή:

| Όνοματεπώνυμο | Βαθμίδα |
|----------------------|-----------------------|
| Νούτσος Δημήτριος | Καθηγητής |
| Χωρίκης Θεόδωρος | Αναπληρωτής Καθηγητής |
| Ξένος Μιχαήλ | Επίκουρος Καθηγητής |

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

“Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή.”

Αμαλία Κοντογιάννη

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Ολοκληρώνοντας την μεταπτυχιακή μου διατριβή αισθάνομαι την ανάγκη να εκφράσω τις ευχαριστίες μου σε κάποιους ανθρώπους, των οποίων η συμβολή ήταν καθοριστική για την εκπόνηση αυτής της διατριβής. Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Δημήτριο Νούτσο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, τη στήριξη και την καθοδήγησή του όποτε και αν τη χρειάστηκα.

Ιδιαίτερα ευχαριστώ τον κ. Μιχαήλ Ξένο που διέθεσε πολύτιμο χρόνο και συνέβαλε στην εκπόνηση αυτής της διπλωματικής εργασίας παρά το φορτωμένο πρόγραμμά του, με τη συνεχή κατεύθυνση των βημάτων μου και την αμέριστη προσφορά του στην προσπάθειά μου αυτή. Η βοήθειά του ήταν καθοριστική, στάθηκε σημαντικός αρωγός και με υποστήριξε σε κάθε φάση της πορείας μου.

Ευχαριστώ επίσης τον κ. Θεόδωρο Χωρίκη που με τίμησε με τη συμμετοχή του στην τριμελή επιτροπή μου. Ευχαριστώ και όλους ανεξαιρέτως τους καθηγητές του τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, τους οποίους είχα την τιμή να γνωρίσω φοιτώντας σε αυτό.

Τέλος, δε μπορώ να μην αναφερθώ στην οικογένεια μου που ήταν δίπλα μου σε κάθε μου βήμα. Χρωστάω σε όλους ένα μεγάλο ευχαριστώ!

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σ' ένα μεγάλο αριθμό φυσικών και μαθηματικών προβλημάτων χρειάζεται μοντελοποίηση με Μερικές Διαφορικές εξισώσεις. Τα περισσότερα φυσικά προβλήματα περιγράφονται με ακρίβεια από Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις των οποίων η ανώτερη τάξης παράγωγος είναι η δεύτερη. Αν και κάποιες από τις εξισώσεις αυτές μπορούν κάτω από ορισμένες συνθήκες να λυθούν αναλυτικά, κατά κανόνα οι περισσότερες από αυτές δεν λύνονται αναλυτικά παρά μόνο με την βοήθεια αριθμητικών μεθόδων. Οι αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης αναπτύχθηκαν ραγδαία τις τελευταίες δεκαετίες, λόγω της εξέλιξης της επιστήμης της πληροφορικής και της κατασκευής ταχύτατων Η/Υ. Ο λόγος είναι προφανής αν λάβει κανείς υπόψη του ότι οι αριθμητικές μέθοδοι απαιτούν ένα τεράστιο αριθμό μαθηματικών πράξεων που μόνο με τη βοήθεια του Η/Υ μπορούν να εκτελεστούν.

Το πρόβλημα που εξετάζουμε στην παρούσα εργασία αφορά την επίλυση ελλειπτικών μερών διαφορικών εξισώσεων (Laplace και Poisson) και συγκεκριμένα το πρόβλημα Dirichlet σε δυο διαστάσεις. Η επίλυση του αλγεβρικού συστήματος $Ax = b$, $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, στο οποίο καταλήγουμε εάν προσπαθήσουμε να λύσουμε αριθμητικά ένα φυσικό πρόβλημα και συγκεκριμένα με τις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων όγκων είναι το βασικό ζητούμενο σε αυτή την εργασία. Στη συνέχεια γίνεται αναπαράσταση των αριθμητικών λύσεων του προβλήματος με γραφήματα και η σύγκρισή τους με τις αναλυτικές λύσεις όπου αυτές είναι γνωστές.

Συγκεκριμένα γίνεται μια γενική αναφορά και κατηγοριοποίηση των Μερικών Διαφορικών εξισώσεων. Οι ελλειπτικές εξισώσεις τις οποίες μελετήσαμε είναι οι Laplace και Poisson. Παρουσιάζονται οι αναλυτικές λύσεις τόσο της Laplace όσο και της Poisson με σκοπό την σύγκρισή τους με τις αντίστοιχες αριθμητικές λύσεις. Στη συνέχεια περιγράφονται οι αριθμητικές μέθοδοι διακριτοποίησης των πεπερασμένων διαφορών και των πεπερασμένων όγκων, η εφαρμογή των οποίων οδηγεί στο αλγεβρικό σύστημα, που προαναφέραμε. Αναπαράγονται οι τύποι πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων όγκων και αναπτύσσονται μέθοδοι επίλυσης για ελλειπτικές μερικές διαφορικές εξισώσεις 2ης τάξης.

Στο επόμενο κεφάλαιο γίνεται παρουσίαση των διάφορων επαναληπτικών μεθόδων όπως η μέθοδος απότομης καθόδου, η μέθοδος συζυγών κλίσεων και η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων τις οποίες εφαρμόσαμε για την επίλυση του αλγεβρικού συστήματος. Έμφαση δίνεται στην εφαρμογή των μεθόδων με μια σύντομη μαθηματική περιγραφή αυτών. Περιγράφεται επίσης μια μέθοδος που συνδυάζει τις επαναληπτικές μεθόδους με την μέθοδο του Νεύτωνα για την επίλυση μη γραμμικών συστημάτων. Επιλύεται το σύστημα που προκύπτει, γραμμικό ή μη γραμμικό, επιλέγοντας μια ή περισσότερες από τις διαθέσιμες μεθόδους και γίνεται η μεταξύ τους σύγκριση. Στο τέλος της εργασίας παρατίθεται κώδικας σε Matlab από την εφαρμογή του οποίου προέκυψαν τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην διπλωματική εργασία.

Το συμπέρασμα στο οποίο καταλήγουμε είναι ότι και οι τρεις επαναληπτικές μέθοδοι δίνουν αξιόπιστα αποτελέσματα. Από τις τρεις αυτές μεθόδους, η μέθοδος συζυγών κλίσεων και η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων είναι ισοδύναμες για την επίλυση συστημάτων στα οποία ο πίνακας των συντελεστών A είναι συμμετρικός. Υπερτερούν σε σχέση με την μέθοδο της απότομης καθόδου όσον αφορά τον αριθμό των επαναλήψεων και την ταχύτητα σύγκλισης. Όσον αφορά το σφάλμα οι μέθοδοι δίνουν αποτελέσματα πολύ κοντά στην αναλυτική λύση όπου αυτή είναι διαθέσιμη.

Συνοψίζοντας, ασχοληθήκαμε με:

- προβλήματα που καταλήγουν σε μεγάλης κλίμακας συστήματα,
- εφαρμογή των επαναληπτικών μεθόδων σε γραμμικά αλλά και σε μη γραμμικά συστήματα (μέθοδος του Νεύτωνα),
- σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών αποτελεσμάτων τα οποία έχουν καλή συμφωνία τόσο για την Laplace όσο και για την Poisson και
- υλοποίηση στο προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab με κώδικα ο οποίος παρατίθεται στο παράρτημα.

ABSTRACT

A large number of physical and mathematical problems can be modeled with Partial Differential Equations (PDEs). Most physical problems are accurately described by 2nd order PDEs. Although some of these equations may under certain circumstances can be solved analytically, most of them they do not have analytical solution and can only be solved numerically with the help of numerical methods. Numerical methods have been developed rapidly over the last decades due to the evolution of numerical analysis, computer science and the construction of high-speed computers. The reason is obvious if one takes into account that numerical methods require a huge number of mathematical operations that can only be performed with the help of a computer.

The problem under consideration deals with the solution of elliptical partial differential equations (Laplace and Poisson PDEs) and in particular the Dirichlet boundary value problem in two spatial dimensions. To solve numerically the physical problem described in this thesis, we end up to the solution of an algebraic system of the form $Ax = b$, $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $b \in \mathbb{R}$. To derive this system we utilized two discretization methods, namely the finite difference and the finite volume methods. The obtained numerical solutions were plotted in contour graphs and the results were compared with the analytical solutions where available.

Initially, a general reference and categorization of the 2nd order PDEs is taking place. The elliptical Laplace and Poisson equations were studied. We present the analytical solutions of both Laplace and Poisson PDEs for comparison with the corresponding numerical solutions. We then describe the numerical discretization methods, the finite differences and the finite volumes methods, the application of which leads to the algebraic system mentioned above. We further present the iterative numerical methods for the solution of the 2nd order elliptic partial differential equations.

In the next chapter, we present three iterative methods for the solution of linear algebraic systems, such as the steepest descend method, the conjugate

gradient method and the generalized method of minimal residuals. A brief mathematical description of these methods follows. Emphasis is placed on the application of the three iterative methods. We also introduce a numerical method that combines the above mentioned iterative methods with Newton's method for solving non-linear algebraic systems. The resulting system, linear or non-linear, is numerically solved by selecting one or more of the available methods and comparing them. At the end of the thesis, the developed numerical code, written in Matlab, is presented in an appendix.

We deduce that all three iterative methods give trusted results. Of these three methods, the conjugate gradient method and the generalized minimal residual method are equivalent for symmetric matrices. These methods are predominantly better compared to the steepest descent method in terms of the iterations and the convergence speed.

Concerning the error, methods yield results very close to the analytical solution where it is available. In summary, we dealt with:

- problems that result in large-scale systems,
- implementation of iterative methods in both linear and non-linear systems (Newton's method),
- comparing analytical and numerical results that have good agreement for both Laplace and Poisson PDEs and
- implementation in the programming environment Matlab with a numerical code listed in the appendix of this thesis.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

| | |
|--|-----------|
| Περίληψη | i |
| Abstract | iii |
| 1 Εισαγωγή | 1 |
| 1.1 Κατηγοριοποίηση των μερικών διαφορικών εξισώσεων | 1 |
| 1.2 Διακριτοποίηση των προβλημάτων ΜΔΕ | 3 |
| 1.3 Ελλειπτικές ΜΔΕ | 3 |
| 1.4 Προβλήματα ελλειπτικού τύπου | 4 |
| 1.4.1 Οι γραμμικές διαφορικές εξισώσεις Laplace και Poisson . | 4 |
| 1.4.2 Αναλυτική λύση της Laplace σε ορθογώνιο χωρίο | 6 |
| 1.4.3 Αναλυτική λύση της Poisson σε ορθογώνιο χωρίο | 9 |
| 1.4.4 Η εξίσωση Poisson με μη γραμμικό ομογενή όρο | 13 |
| 2 Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης | 15 |
| 2.1 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών | 16 |
| 2.2 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων | 20 |
| 2.3 Τανυστικά γινόμενα | 23 |
| 3 Επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης αλγεβρικών συστημάτων | 25 |
| 3.1 Εισαγωγή | 25 |
| 3.2 Μέθοδος απότομης καθόδου | 26 |
| 3.2.1 Αλγόριθμος μεθόδου απότομης καθόδου | 28 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.2.2 | Σύγκλιση της μεθόδου απότομης καθόδου | 28 |
| 3.3 | Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων | 29 |
| 3.3.1 | Αλγόριθμος μεθόδου Συζυγών Κλίσεων | 30 |
| 3.3.2 | Σύγκλιση της μεθόδου Συζυγών Κλίσεων | 30 |
| 3.3.3 | Πολυπλοκότητα της μεθόδου Συζυγών Κλίσεων | 31 |
| 3.4 | Γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων | 32 |
| 3.4.1 | Περιγραφή της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων | 33 |
| 3.4.2 | Πολυπλοκότητα της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων | 35 |
| 3.4.3 | Σύγκλιση της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων | 35 |
| 3.5 | Προρρύθμιση Γραμμικών συστημάτων | 36 |
| 3.5.1 | Κατηγορίες Προρρυθμιστών | 36 |
| 3.6 | Αριθμητική επίλυση του μη γραμμικού προβλήματος | 37 |
| 3.6.1 | Περιγραφή της μεθόδου του Νεύτωνα | 38 |
| 3.6.2 | Πλεονεκτήματα - Μειονεκτήματα της μεθόδου του Νεύτωνα | 40 |
| 3.6.3 | Σύγκλιση της μεθόδου του Νεύτωνα | 41 |
| 4 | Ανάλυση αποτελεσμάτων | 43 |
| 4.1 | Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων | 44 |
| 4.1.1 | Εφαρμογή σε συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα | 44 |
| 4.1.2 | Εφαρμογή σε μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα | 51 |
| 4.2 | Το μη γραμμικό πρόβλημα | 52 |
| 5 | Συζήτηση - Συμπεράσματα | 57 |
| | Βιβλιογραφία | 61 |
| | Παράρτημα | 65 |

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Μια μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ) είναι μια σχέση που συνδέει μια άγνωστη συνάρτηση χωρικών ή χρονικών ανεξάρτητων μεταβλητών και τις μερικές παραγώγους της συνάρτησης αυτής ως προς αυτές τις μεταβλητές. Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις συναντώνται στην διατύπωση και συνεπώς στην επίλυση φυσικών φαινομένων (προβλημάτων), όπως η ροή των ρευστών, η διάδοση της θερμότητας, η διάδοση των κυμάτων, η διάχυση χημικών ουσιών, η ταλάντωση των στερεών καθώς και σε προβλήματα Μηχανικής και Ρευστομηχανικής. Οι εξισώσεις αυτές περιγράφουν κατά μοναδικό τρόπο τα φαινόμενα που μοντελοποιούν, εάν συμπληρωθούν με κατάλληλες οριακές συνθήκες (αρχικές και συνοριακές).

1.1 Κατηγοριοποίηση των μερικών διαφορικών εξισώσεων

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με μερικές διαφορικές εξισώσεις 2ης τάξης με δυο ανεξάρτητες μεταβλητές, οι οποίες περιέχουν ως άγνωστο αντικείμενο μια τουλάχιστον από τις παραγώγους 2ης τάξης της άγνωστης συνάρτησης [1, 2].

Ορισμός: Η γενική μορφή μιας ΜΔΕ 2ης τάξης είναι:

$$a_{11}u_{xx} + 2a_{12}u_{xy} + a_{22}u_{yy} + a_1u_x + a_2u_y + a_0u = f \quad (1.1)$$

όπου a_{ij} , a_i με $i, j = 1, 2$, γνωστές συναρτήσεις με κοινό πεδίο ορισμού μια ανοιχτή περιοχή Ω του xy επιπέδου, και f είναι συνάρτηση των x και y . Υποτίθεται ότι η τριάδα a_{11}, a_{12}, a_{22} δεν μηδενίζεται ταυτόχρονα στην περιοχή Ω . Σε αντίθετη περίπτωση θα έπαινε να είναι δεύτερης τάξης.

Η κατηγοριοποίηση των εξισώσεων γίνεται με βάση το είδος των κωνικών

τομών που περιγράφονται από την χαρακτηριστική εξίσωση:

$$a_{11}x^2 + a_{12}xy + a_{22}y^2 + a_1x + a_2y + a_0 = 0. \quad (1.2)$$

Αν θεωρήσουμε ότι τα a_{ij}, a_i είναι πραγματικοί αριθμοί τότε ταξινομούμε τις ΜΔΕ ως εξής:

υπερβολικού τύπου αν

$$a_{12}^2 - a_{11}a_{22} > 0 \quad (1.3)$$

ελλειπτικού τύπου αν

$$a_{12}^2 - a_{11}a_{22} < 0 \quad (1.4)$$

παραβολικού τύπου αν

$$a_{12}^2 - a_{11}a_{22} = 0 \quad (1.5)$$

Σημείωση: Ο τύπος της εξίσωσης (1.2) καθορίζεται μόνο από τους συντελεστές των όρων δεύτερης τάξης στους οποίους βασίζεται και η κατηγοριοποίησή τους. Οι συντελεστές των όρων χαμηλότερης τάξης δεν παίζουν κανένα ρόλο.

Σημείωση: (Επεξήγηση ονοματολογίας) Η ονοματολογία της ΜΔΕ οφείλεται στο γεγονός ότι η καμπύλη της χαρακτηριστικής εξίσωσης (1.2) είναι υπερβολή, έλλειψη, και παραβολή αντίστοιχα σε κάθε περίπτωση. Σ' αυτό το γεγονός οφείλουν την ονομασία τους οι διάφορες μορφές της εξίσωσης [2].

Ο ορισμός της υπερβολικότητας, της ελλειπτικότητας και της παραβολικότητας της εξίσωσης στην περίπτωση που οι συντελεστές είναι συναρτήσεις των μεταβλητών x και y είναι εντελώς ανάλογος με εκείνον της περίπτωσης σταθερών συντελεστών. Συγκεκριμένα, αν η ποσότητα $[a_{12}(x, y)]^2$ είναι μικρότερη, μεγαλύτερη ή ίση, αντίστοιχα, της $a_{11}(x, y)a_{22}(x, y)$, τότε η εξίσωση είναι στο σημείο (x, y) ελλειπτική, υπερβολική ή παραβολική, αντίστοιχα. Φυσικά είναι δυνατόν η εξίσωση να είναι διαφορετικού τύπου σε διάφορες περιοχές του επιπέδου xy δυο διαστάσεων. Ο τύπος της μερικής διαφορικής εξίσωσης προσδιορίζει τη φύση του προβλήματος που περιγράφεται.

- Οι παραβολικές εξισώσεις, με χαρακτηριστικό παράδειγμα την εξίσωση θερμικής αγωγιμότητας, εμπεριέχουν χρονική εξάρτηση και περιγράφουν φαινόμενα διάχυσης. Οι λύσεις τους συνήθως μειώνονται εκθετικά στο χρόνο προσεγγίζοντας τη θέση ισορροπίας.
- Οι υπερβολικές εξισώσεις με χαρακτηριστικό πρότυπο την κυματική εξίσωση, εξαρτώνται από το χρόνο και περιγράφουν φαινόμενα διάδοσης. Περιγράφουν την διάδοση (μεταφορά) μιας φυσικής οντότητας, όπως για παράδειγμα ένα ακουστικό σήμα, μία διαταραχή κ.τ.λ. που εκφράζεται από

την εξαρτημένη μεταβλητή από μια αρχική σε μια μεταγενέστερη θέση στο χρόνο και το χώρο.

- Αντίθετα με τις προηγούμενες κατηγορίες οι ελλειπτικές εξισώσεις περιγράφουν τη στατική συμπεριφορά ενός μεγέθους σε ορισμένη περιοχή, χωρίς να υπάρχει χρονική εξάρτηση. Χαρακτηριστικές ελλειπτικές εξισώσεις είναι οι εξισώσεις Laplace και Poisson.

1.2 Διακριτοποίηση των προβλημάτων ΜΔΕ

Για την επίλυση προβλημάτων ΜΔΕ έχουν αναπτυχθεί αναλυτικές και αριθμητικές μέθοδοι.

Οι αναλυτικές μέθοδοι παρέχουν ακριβείς λύσεις, όμως πολλές φορές λόγω της μη γραμμικότητας των ΜΔΕ η αναλυτική λύση δεν είναι δυνατή ή δίνεται με περίπλοκη έκφραση. Επειδή λοιπόν η αναλυτική λύση μπορεί να μην βρεθεί επιλύουμε το πρόβλημα προσεγγιστικά αφού πρώτα το διακριτοποιήσουμε [3].

Η διαδικασία της διακριτοποίησης περιλαμβάνει διακριτοποίηση του χωρίου δημιουργώντας κάποιο υπολογιστικό πλέγμα και προσέγγιση της ΔΕ με εξισώσεις διαφορών σε κάθε υπολογιστικό κόμβο, η οποία οδηγεί σ' ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Έτσι από το συνεχές πρόβλημα μεταβαίνουμε στο διακριτό. Για το διακριτό πρόβλημα που προκύπτει έχουν αναπτυχθεί αριθμητικές μέθοδοι. Θα αναφερθούμε στο 3ο Κεφάλαιο σε δυο από αυτές, στην μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και στη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Η εφαρμογή των μεθόδων αυτών οδηγεί σε παρόμοιο αριθμητικό σχήμα και κάθε φορά ανάλογα με τη φύση του προβλήματος επιλέγουμε την κατάλληλη μέθοδο [4, 5].

1.3 Ελλειπτικές ΜΔΕ

Οι πλέον συνηθισμένες ελλειπτικές εξισώσεις με πλήθος εφαρμογών σε πολλά επιστημονικά και τεχνολογικά πεδία είναι οι εξισώσεις Laplace, βασική εξίσωση της θεωρίας δυναμικού

$$\nabla^2 u = 0, \quad (1.6)$$

και Poisson, εξίσωση που περιγράφει το βαρυντικό πεδίο στο εσωτερικό ενός σώ-

ματος ή το ηλεκτρικό πεδίο στο εσωτερικό ενός φορτισμένου σώματος

$$-\nabla^2 u = f, \quad (1.7)$$

όπου $\nabla^2 = \partial_{xx} + \partial_{yy}$ ο τελεστής Laplace, $u = u(x, y)$ η άγνωστη εξαρτημένη μεταβλητή και $f = f(x, y)$ μια γνωστή συνάρτηση. Οι συναρτήσεις u, f θεωρούμε ότι έχουν συνεχείς μερικές παραγώγους κάθε τάξης σε όλα τα σημεία του πεδίου ορισμού τους, είναι δηλαδή αρκετά ομαλές συναρτήσεις στο πεδίο ορισμού τους, Ω .

Οι ελλειπτικές εξισώσεις περιγράφουν προβλήματα οριακών τιμών, δηλαδή φαινόμενα ισορροπίας σε μόνιμα (όχι χρονικά μεταβαλλόμενα) προβλήματα όπως βαρυτικά και ηλεκτροστατικά πεδία, μόνιμη θερμική αγωγή, ιδανική ή πλήρης ανεπτυγμένη ιξωδική ροή κλπ. Οι ελλειπτικές εξισώσεις ορίζονται σε κλειστά πεδία ορισμού Ω με την εξαρτημένη μεταβλητή να ορίζεται με οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet, Neumann ή μικτές (Robin) στο κλειστό όριο (σύνορο) του πεδίου ορισμού.

Γενικά το χωρίο Ω είναι πάντοτε “κλειστό” και η γεωμετρία του παίζει καθοριστικό ρόλο στην ευκολία ή δυσκολία της αριθμητικής επίλυσης του προβλήματος. Κάθε συνάρτηση που ικανοποιεί την εξίσωση Laplace καλείται αρμονική συνάρτηση ενώ η συνάρτηση $f = f(x, y)$ που συναντάμε στην εξίσωση Poisson καλείται πηγή (source term) και θεωρείται γνωστή στο χωρίο Ω που ορίζεται η $u = u(x, y)$. Μια “διαταραχή” που δημιουργείται ή υπάρχει στο εσωτερικό του Ω , σ’ ένα σημείο P , επιδρά σε όλα τα “υπολογιστικά” (κομβικά) σημεία του. Αυτό σημαίνει ότι η λύση ενός φυσικού προβλήματος που περιγράφεται από μια ΜΔΕ ελλειπτικού τύπου θα είναι δυνατόν να υπολογιστεί εφόσον έχουν δοθεί συνθήκες για τη άγνωστη συνάρτηση σε όλο το σύνορο του χωρίου Ω .

1.4 Προβλήματα ελλειπτικού τύπου

1.4.1 Οι γραμμικές διαφορικές εξισώσεις Laplace και Poisson

Η εξίσωση Laplace σε δύο διαστάσεις

$$\nabla^2 u \equiv (u_{xx} + u_{yy}) = 0 \quad (1.8)$$

είναι μια κλασική εξίσωση της Φυσικής και απαντάται σε πολλά προβλήματα που σχετίζονται με πεδία και δυναμικά. Με βάση τους προηγούμενους ορισμούς είναι

μια ελλειπτική διαφορική εξίσωση με μερικές παραγώγους. Όσα θα αναπτύξουμε μπορούν εύκολα να γενικευθούν στη εξίσωση Poisson

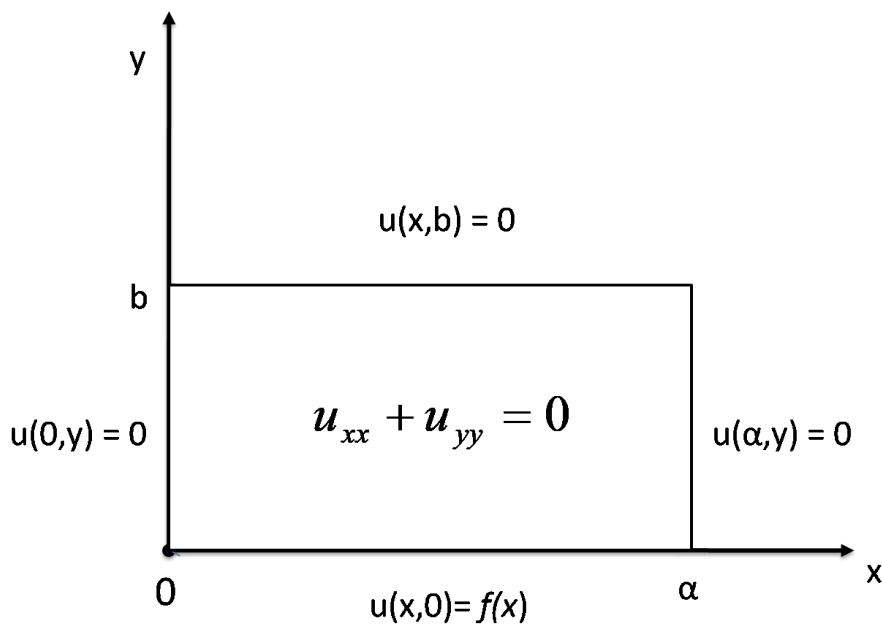
$$-\nabla^2 u \equiv -(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y)$$

όπου $u(x, y)$ είναι μια συνάρτηση ορισμένη σε μια κλειστή περιοχή Ω .

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας θεωρούμε το πρόβλημα Dirichlet για την εξίσωση του Laplace σε ένα ορθογώνιο χωρίο Ω , υποθέτοντας ότι η βαθμωτή συνάρτηση $u = u(x, y)$ ισούται με μια δεδομένη συνάρτηση f στην κάτω πλευρά και με 0 στις άλλες τρεις πλευρές του ορθογωνίου. Έτσι οι συνοριακές τιμές στο ορθογώνιο χωρίο $[0, a] \times [0, b]$ ορίζονται ως εξής:

$$\begin{cases} u(x, 0) = \sin \frac{\pi x}{a}, x \in [0, a] \\ u(x, b) = 0, x \in [0, a] \\ u(0, y) = 0, y \in [0, b] \\ u(a, y) = 0, y \in [0, b] \end{cases}$$

Σχηματικά το πρόβλημα συνοριακών τιμών αναπαρίσταται ως εξής:



Σχήμα 1.1: Παράσταση συνθηκών Dirichlet για την εξίσωση του Laplace σε ένα ορθογώνιο χωρίο.

1.4.2 Αναλυτική λύση της Laplace σε ορθογώνιο χωρίο

Οι ΜΔΕ μπορούν να λυθούν με διάφορες αναλυτικές μεθόδους. Οι πιο γνωστές και αυτές που χρησιμοποιούνται συχνότερα και όχι μόνο για ελλειπτικού τύπου προβλήματα είναι [1, 6]:

- Η μέθοδος του χωρισμού μεταβλητών, (separation of variables), με την οποία θα επιλύσουμε την εξίσωση Laplace και θα αναφερθούμε στη συνέχεια.
- Η μέθοδος μιγαδικής παραμέτρου, (complex variables method).
- Η μέθοδος της συνάρτησης Green, (Green's function method).
- Η μέθοδος των χαρακτηριστικών. Σε ειδικές περιπτώσεις, μπορεί κανείς να βρει χαρακτηριστικές καμπύλες των οποίων η εξίσωση ανάγεται σε μια ΣΔΕ και επιτρέπει το διαχωρισμό των μεταβλητών.
- Αρχικός Μετασχηματισμός. Ένας αρχικός μετασχηματισμός μπορεί να μετατρέψει την ΜΔΕ σε μια απλούστερη, ιδιαίτερα σε μια ΜΔΕ που μπορεί να επιλυθεί με την μέθοδο χωριζομένων μεταβλητών.
- Αλλαγή των μεταβλητών. Συχνά μια ΜΔΕ μπορεί να αναχθεί σε μια απλούστερη μορφή με μια γνωστή λύση από μια κατάλληλη αλλαγή μεταβλητών.

Μέθοδος χωριζομένων μεταβλητών για την εξίσωση Laplace

Έστω η εξίσωση Laplace

$$\nabla^2 u \equiv (u_{xx} + u_{yy}) = 0 \quad (1.9)$$

όπου u μια αρκετά ομαλή συνάρτηση.

Η μέθοδος εύρεσης της αναλυτικής λύσης που θα χρησιμοποιηθεί είναι αυτή του χωρισμού μεταβλητών, η οποία βασίζεται σε μια αρχική παραδοχή της γενικής μορφής της ζητούμενης λύσης, ως γινόμενο συναρτήσεων μίας μεταβλητής. Όπως θα δούμε, η εφαρμογή του χωρισμού μεταβλητών ανάγει το πρόβλημα στην επίλυση δυο επιμέρους προβλημάτων που περιλαμβάνουν συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, οι οποίες είναι αποτέλεσμα του γεγονότος ότι εξαιτίας της αρχικής παραδοχής οι μεταβλητές είναι δυνατό να διαχωριστούν πλήρως. Η μία από τις εξισώσεις, σε συνδυασμό με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες, οδηγεί σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμών. Οι συναρτήσεις που τελικά, επιλύουν την εξίσωση Laplace

και ικανοποιούν τις ομογενείς συνοριακές συνθήκες είναι άπειρες σε πλήθος και η υπέρθεση αυτών είναι απαραίτητη, έτσι ώστε να προκύψει εκείνη η συνάρτηση που ικανοποιεί όλες τις βοηθητικές, συμπεριλαμβανομένων και των μη ομογενών, συνθηκών του προβλήματος.

Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή οι λύσεις θα είναι της μορφής $u(x, y) = X(x)Y(y)$ όπου η $X(x)$ είναι συνάρτηση μόνο της μεταβλητής x και η $Y(y)$ συνάρτηση μόνο της μεταβλητής y . Με αντικατάσταση στην (1.9) προκύπτει:

$$Y \frac{\partial X^2}{\partial x^2} + X \frac{\partial Y^2}{\partial y^2} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{X} \frac{\partial X^2}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial Y^2}{\partial y^2} = 0 \Leftrightarrow \frac{X''}{X} = -\frac{Y''}{Y} = -\lambda \quad (1.10)$$

Οι δυο όροι της (1.10) είναι συναρτήσεις μόνο μιας μεταβλητής ($X(x)$, $Y(y)$) και για να ισχύει η ισότητα θα πρέπει κάθε όρος να ισούται με μια σταθερά, οπότε προκύπτει το πρόβλημα

$$X'' + \lambda X = 0,$$

με $X(0) = 0$ και $X(a) = 0$ και,

$$Y'' - \lambda Y = 0,$$

όπου λ μια θετική σταθερά.

Η γενική λύση που προκύπτει για το

$$X'' + \lambda X = 0,$$

είναι:

αν $\lambda = \kappa^2 > 0$ τότε

$$X(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x).$$

Από $X(0) = 0 \Rightarrow B = 0$ και από $X(a) = 0 \Rightarrow A \sin(\kappa a) = 0 \Rightarrow \kappa a = n\pi \Rightarrow \kappa = \frac{n\pi}{a}$. Άρα προσδιορίζεται μια άπειρη ακολουθία από ιδιοσυναρτήσεις της μορφής

$$X_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 1, 2, 3, \dots,$$

οι οποίες σχετίζονται με τις άπειρες διακριτές ιδιοτιμές $\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$.

Αντικαθιστώντας στη δεύτερη εξίσωση αυτή παίρνει την μορφή

$$Y'' - \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 Y = 0. \quad (1.11)$$

Η χαρακτηριστική εξίσωση της (1.11) έχει δυο πραγματικές διακριτές ρίζες οπότε η γενική λύση της είναι:

$$Y(y) = C \sinh \left[\frac{n\pi}{a}(b-y) \right] + D \cosh \left[\frac{n\pi}{a}(b-y) \right]. \quad (1.12)$$

Η συνθήκη $Y(b) = 0$ συνεπάγεται ότι $D = 0$. Συνεπώς οι λύσεις της (1.12) που ικανοποιούν την αντίστοιχη συνθήκη έχουν τη μορφή

$$Y_n(y) = C \sinh \left[\frac{n\pi}{a}(b-y) \right].$$

Τελικά οι λύσεις της εξίσωσης Laplace που ικανοποιούν τις τρεις συνοριακές συνθήκες έχουν τη μορφή

$$u_n(x, y) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh \left[\frac{n\pi}{a}(b-y) \right],$$

όπου οι δυο σταθεροί συντελεστές έχουν συγχωνευθεί σε έναν. Γενικά η λύση του προβλήματος έχει τη μορφή,

$$u(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh \left[\frac{n\pi}{a}(b-y) \right].$$

Λαμβάνοντας υπόψη την τέταρτη συνθήκη $u(x, 0) = f(x)$ έχουμε ότι:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left(\frac{n\pi}{a}b\right).$$

Πρέπει δηλαδή η $f(x)$ να παρασταθεί ως γραμμικός συνδυασμός άπειρων ιδιοσυναρτήσεων $\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$, δηλαδή

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

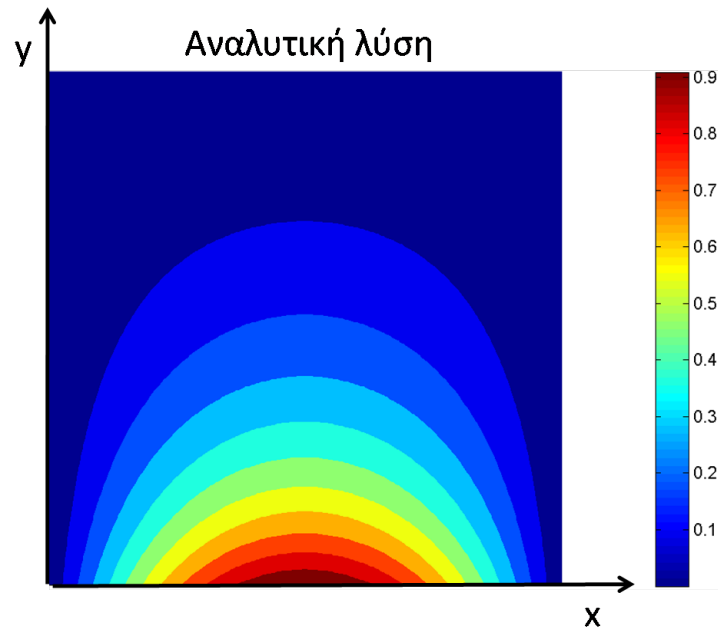
Οι συντελεστές a_n , είναι συντελεστές της σειράς Fourier. Οπότε οι συντελεστές A_n είναι: $A_n = \frac{a_n}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)}$ με

$$a_n = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

Άρα τελικά η λύση του Π.Σ.Τ είναι:

$$u(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left[\frac{n\pi}{a}(b-y)\right].$$

Παρατήρηση: Η γραφική παράσταση της αναλυτικής λύσης εμφανίζεται στο σχήμα 1.2 για το ορθογώνιο χωρίο που μελετάται. Ο κώδικας στο προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab που περιγράφει την αναλυτική λύση δίνεται στο παράρτημα, `analytiki2b.m`. Περισσότερες πληροφορίες για την μεθοδολογία χωρίζομένων μεταβλητών που αναπτύχθηκε για την επίλυση της Laplace μπορούν να αναζητηθούν στο [2].



Σχήμα 1.2: Αναλυτική λύση της εξίσωσης Laplace.

1.4.3 Αναλυτική λύση της Poisson σε ορθογώνιο χωρίο

Έστω η εξίσωση Poisson

$$-\nabla^2 u = -(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y) \quad (1.13)$$

όπου u μια αρκετά ομαλή συνάρτηση και $0 < x < \alpha$, $0 < y < b$.

Το πρόβλημα διασπάται σε δυο ειδικότερα προβλήματα, ένα για την εξίσωση του Poisson με ομογενείς συνοριακές συνθήκες και ένα για την εξίσωση του Laplace. Έτσι αν u_1 και u_2 είναι οι λύσεις των προβλημάτων αντίστοιχα τότε το αθροισμάτους $u_1 + u_2$ είναι λύση του αρχικού προβλήματος.

Το πρώτο πρόβλημα είναι:

$$u_{xx} + u_{yy} = 0$$

με συνοριακές συνθήκες

$$\begin{cases} u(x, 0) = \sin \frac{\pi x}{a}, x \in [0, a] \\ u(x, b) = 0, x \in [0, a] \\ u(0, y) = 0, y \in [0, b] \\ u(a, y) = 0, y \in [0, b] \end{cases}$$

και το δεύτερο πρόβλημα είναι:

$$u_{xx} + u_{yy} = -xy$$

με συνοριακές συνθήκες

$$\begin{cases} u(x, 0) = 0, x \in [0, a] \\ u(x, b) = 0, x \in [0, a] \\ u(0, y) = 0, y \in [0, b] \\ u(a, y) = 0, y \in [0, b] \end{cases}$$

Το πρώτο πρόβλημα λύνεται με την μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών. Η λύση του, η οποία υπολογίστηκε αναλυτικά στην προηγούμενη παράγραφο δίνεται από την σχέση

$$u_1(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left[\frac{n\pi}{a}(b - y)\right]$$

όπου $A_n = \frac{a_n}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)}$ με

$$a_n = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx.$$

Η λύση $u_2(x, y)$ βρίσκεται με την μέθοδο ανάπτυξης σε πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων για την $-\Delta$. Αναζητούμε λύση της μορφής

$$u_2(x, y) = \sum_{n,m=1}^{\infty} c_{nm} \phi_{nm}(x, y)$$

όπου ϕ_{nm} ιδιοσυναρτήσεις της $-\Delta$, δηλαδή ικανοποιούν το παρακάτω πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\begin{cases} \Delta \phi + \lambda \phi = \phi_{xx} + \phi_{yy} + \lambda \phi = 0 \\ \phi = 0 \end{cases}$$

στο σύνολο.

Με αντικατάσταση και αφού οι ϕ_{nm} είναι ορθογώνιες θα έχουμε

$$xy = \sum_{n,m=1}^{\infty} c_{nm} \lambda_{nm} \phi_{nm}.$$

Στη συνέχεια έχουμε

$$c_{nm} \lambda_{nm} = \frac{1}{\|\phi_{nm}\|_{L^2}^2} \int_0^a \int_0^b xy \phi_{nm}(x, y) dx dy$$

όπου

$$\|\phi_{nm}\|_{L^2}^2 = \int_0^a \int_0^b \phi_{nm}^2(x, y) dx dy.$$

Βρίσκουμε τα ιδιοζεύγη $(\lambda_{nm}, \phi_{nm})$ θέτοντας $\phi(x, y) = X(x)Y(y)$. Προκύπτουν δυο συστήματα από τα οποία βρίσκουμε τις συναρτήσεις $X(x)$, $Y(y)$ και το λ_{nm} ως εξής:

$$X_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{a},$$

$$Y_m(y) = \sin \frac{m\pi y}{b}$$

και

$$\lambda_{nm} = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} + \frac{m^2 \pi^2}{b^2}$$

Η λύση τελικά που βρίσκουμε είναι:

$$u_2(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{nm} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{b}.$$

Οπότε η αναλυτική λύση της εξίσωσης Poisson θα είναι:

$$u(x, y) = u_1(x, y) + u_2(x, y)$$

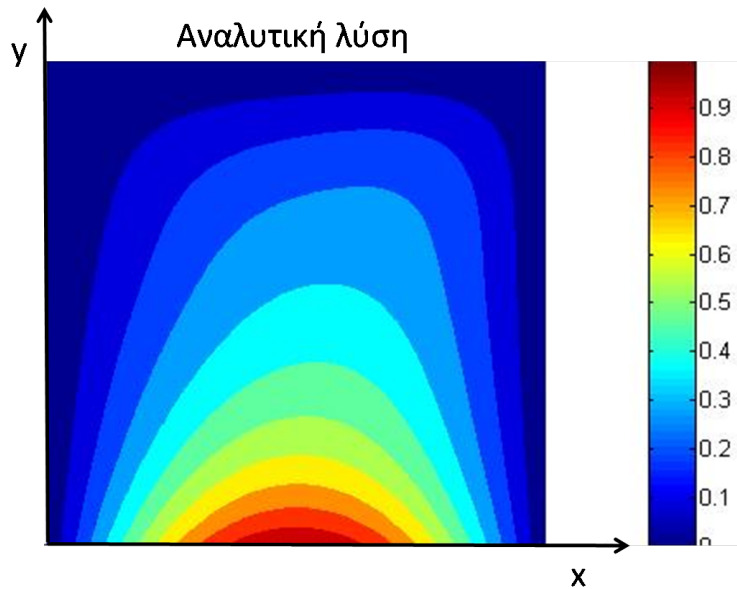
δηλαδή

$$u(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left[\frac{n\pi}{a}(b-y)\right] + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{nm} \sin\frac{n\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b}$$

όπου $A_n = \frac{a_n}{\sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)}$ με

$$a_n = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx.$$

Παρατήρηση: Η γραφική παράσταση της αναλυτικής λύσης εμφανίζεται στο σχήμα 1.3 για το ορθογώνιο χωρίο που μελετάται. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να αναζητηθούν στα σύγγραμματα του κ. Γ. Δ. Ακρίβη [2] και της κα. Ε. Πετροπούλου [6].



Σχήμα 1.3: Αναλυτική λύση της εξίσωσης Poisson.

1.4.4 Η εξίσωση Poisson με μη γραμμικό ομογενή όρο

Οι ΜΔΕ είναι γενικά περίπλοκες και δύσκολες στην αναζήτηση των λύσεών τους ειδικά στην περίπτωση που η f δεν είναι γραμμική. Στην παρούσα εργασία θα μελετήσουμε τη μη γραμμική Poisson

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y, u)$$

όπου $f(x, y, u)$ είναι μια μη γραμμική συνάρτηση π.χ. $f(x, y, u) = u^2(x, y)$. Το σύστημα που προκύπτει σε αυτή την περίπτωση είναι μη γραμμικό και χρησιμοποιούνται διάφορες αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης.

Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι τρεις πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες αριθμητικές μέθοδοι επικεντρώνοντας την προσοχή μας στις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών (ΜΠΔ) και πεπερασμένων όγκων (ΜΠΟ). Το μη γραμμικό πρόβλημα επιλύεται με μια υβριδική μέθοδο που συνδυάζει επαναληπτικές μεθόδους για γραμμικά συστήματα και μεθόδους για μη γραμμικά. Η κυριότερη μέθοδος για μη γραμμικά συστήματα και αυτή στην οποία θα εστιάσουμε είναι η μέθοδος του Νεύτωνα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

Για την επίλυση προβλημάτων ΜΔΕ έχουν αναπτυχθεί αναλυτικές και αριθμητικές μέθοδοι. Πολλές φορές λόγω της μη γραμμικότητας των ΜΔΕ η αναλυτική λύση δεν είναι δυνατή ή δίνεται με περίπλοκη έκφραση. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την εφαρμογή αριθμητικών μεθόδων διακριτοποίησης. Η καταλληλότητα της αριθμητικής μεθόδου για την επίλυση μιας ΜΔΕ εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, με κυρίαρχο τη φύση της ΔΕ, την ακρίβεια και την ευστάθεια της μεθόδου, την εύκολη υλοποίηση αλγορίθμου, το ποσό της μνήμης του υπολογιστικού συστήματος που δεσμεύεται και την αντιστρεψιμότητά του. Οι τρεις πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση ΜΔΕ είναι:

- η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (ΜΠΣ)
- η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων (ΜΠΟ)
- η μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (ΜΠΔ).

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (ΜΠΣ), είναι μια αριθμητική τεχνική για την εύρεση αριθμητικών λύσεων των μερικών διαφορικών εξισώσεων (ΜΔΕ), καθώς και των ολοκληρωτικών εξισώσεων. Σύμφωνα με αυτήν τη μέθοδο ο χώρος διαιρείται σε έναν αριθμό στοιχείων, τα οποία είναι συνήθως μη δομημένα. Αρχικά οι μερικές διαφορικές εξισώσεις σε κάθε στοιχείο πολλαπλασιάζονται με έναν συντελεστή, προτού συμπεριληφθούν στο σύστημα των εξισώσεων. Στη συνέχεια η λύση προσεγγίζεται με μια νέα συνάρτηση για κάθε στοιχείο με τέτοιο τρόπο ώστε να διατηρείται η συνοχή της λύσης στα όρια των στοιχείων. Έχει επιδείξει έως σήμερα θετικά αποτελέσματα και εφαρμόζεται επιτυχώς σε προβλήματα υπολογιστικής ρευστομηχανικής [3].

Στην παρούσα εργασία θα εφαρμόσουμε την ΜΠΔ και την ΜΠΟ, στις οποίες θα αναφερθούμε αναλυτικά παρακάτω. Η ΜΠΔ είναι η πλέον αποδοτική και ευκολότερη στην εφαρμογή της για αριθμητικές επιλύσεις σε χωρία με σχετικά απλή

γεωμετρία. Μπορεί να εφαρμοστεί σε κάθε είδους πλέγματα με τα πλεονεκτήματά της να επιτυγχάνονται μόνο σε δομημένα πλέγματα. Αντίστοιχα η ΜΠΟ είναι συντηρητική, και εύκολη στον προγραμματισμό και την κατανόηση. Το μειονέκτημα έναντι της ΜΠΔ είναι το κάπως υψηλότερο υπολογιστικό κόστος και η δυσκολία ανάπτυξης μεθόδων υψηλής τάξης ακρίβειας.

2.1 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών αποδίδεται στον Euler (1707-1783) ο οποίος αναζητούσε προσεγγιστικές λύσεις Διαφορικών εξισώσεων. Αναπτύχθηκε συστηματικά μετά το 1945 όταν οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές ήταν πλέον διαθέσιμοι. Αποτελεί τη βάση για πιο περίπλοκες μεθόδους λόγω της εύκολης υλοποίησής της. Η επιτυχής επίλυση με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών εξαρτάται από τις δυνατότητες του υπολογιστικού συστήματος και τον κώδικα. Στην παρούσα εργασία ο κώδικας υλοποιήθηκε στο υπολογιστικό περιβάλλον Matlab (MathWorks, Natick, MA, US, version R2013a).

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών (ΠΔ) προϋπήρξε των υπολοίπων μεθόδων και συνίσταται στην αντικατάσταση κάθε παραγώγου της μερικής διαφορικής εξίσωσης με προσεγγιστικά πηλίκα διαφορών χρησιμοποιώντας τον ορισμό της παραγώγου. Τα πλεονεκτήματα αυτής της μεθόδου είναι ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα μεταβλητών συντελεστών ή μη γραμμικά προβλήματα και με μικρή υπολογιστική προσπάθεια μπορεί να παρέχει ποσοτικές προσεγγίσεις. Η εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών περιλαμβάνει τα εξής στάδια:

- Διακριτοποίηση του πεδίου ορισμού του προβλήματος και αντικατάστασή του με υπολογιστικό πλέγμα.
- Διακριτοποίηση της μερικής διαφορικής εξίσωσης και των οριακών συνθηκών στους κόμβους του πλέγματος και
- Την επίλυση του αλγεβρικού συστήματος που διαμορφώνεται από τις εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών.

Εφαρμόζουμε τη μέθοδο ΠΔ για την εξίσωση Poisson,

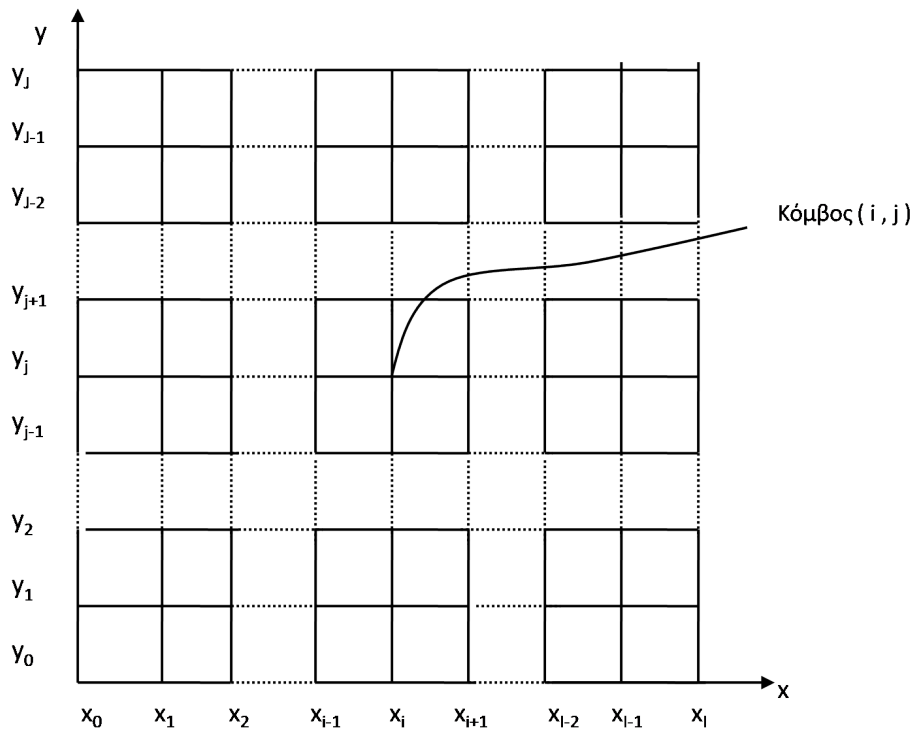
$$-\frac{\partial u^2}{\partial x^2} - \frac{\partial u^2}{\partial y^2} = f(x, y),$$

για την συνάρτηση $u(x, y)$ σε μια κλειστή περιοχή Ω με $0 < x < a$, $0 < y < b$ και Dirichlet συνθήκη για την u στο όριο Γ του πεδίου ορισμού. Το παραπάνω

πρόβλημα αντιπροσωπεύει διάφορες απλές εφαρμογές μια εκ των οποίων είναι και η διάχυση της θερμότητας T , στο χωρίο Ω ,

$$\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b\}.$$

Το πρώτο βήμα εφαρμογής της μεθόδου περιλαμβάνει την επιλογή του υπολογιστικού πλέγματος. Δημιουργούμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό κατά μήκος των αξόνων x και y σε I και J ίσα τμήματα αντίστοιχα. Τα μήκη των ευθύγραμμων τμημάτων κατά μήκος των αξόνων x και y έχουν μήκος $\Delta x = \frac{a}{I}$ και $\Delta y = \frac{b}{J}$. Τα σημεία που ορίζουν τους κόμβους κατά μήκος του άξονα x και y προσδιορίζονται από τις σχέσεις $x_i = x_0 + i\Delta x$, $i = 0, 1, 2, \dots, I$ και $y_j = y_0 + j\Delta y$, $j = 0, 1, 2, \dots, J$, αντίστοιχα. Από τα σημεία x_i και y_j φέρνουμε παράλληλες προς τους άξονες x και y αντίστοιχα με αποτέλεσμα το συνεχές πεδίο ορισμού να αντικατασταθεί από το υπολογιστικό πλέγμα που απαρτίζεται από $I \times J$ ίσα ορθογώνια οι κορυφές των οποίων ονομάζονται κόμβοι και αποτελούν τα δομικά στοιχεία του πλέγματος όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 2.1: Υπολογιστικό πλέγμα και κόμβοι πλέγματος.

Το επόμενο βήμα περιλαμβάνει τη διατύπωση της εξίσωσης πεπερασμένων διαφορών σε κάθε εσωτερικό κόμβο του πλέγματος. Προσεγγίζουμε τη μερική διαφορική εξίσωση Poisson στον τυχαίο κόμβο (i, j) του πλέγματος ως εξής:

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{i,j} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big|_{i,j} = f(x_i, y_j) \quad (2.1)$$

με $i = 1, 2, \dots, I - 1$, $j = 1, 2, \dots, J - 1$.

Επιλέγουμε να προσεγγίσουμε τις δεύτερες παραγώγους με κεντρικές πεπερασμένες διαφορές 2ης τάξης κάτι το οποίο χρησιμοποιείται στην περίπτωση των ελλειπτικών εξισώσεων [8]. Η προσέγγιση των δεύτερων παραγώγων βασίζεται στο θεώρημα Taylor σύμφωνα με το οποίο έχουμε τις παρακάτω σχέσεις:

$$u(x+h, y) = u(x, y) + \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} \frac{\Delta x^2}{2} + \dots$$

και

$$u(x-h, y) = u(x, y) - \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} \frac{\Delta x^2}{2} - \dots$$

Με αφαίρεση κατά μέλη των παραπάνω σχέσεων παίρνουμε την προσέγγιση της πρώτης παραγώγου ως εξής:

$$u(x+h, y) - u(x-h, y) = 2 \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \Delta x \Leftrightarrow \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \frac{u(x+h, y) - u(x-h, y)}{2\Delta x}$$

Αντίστοιχα με πρόσθεση κατά μέλη των ίδιων σχέσεων παίρνουμε την προσέγγιση της δεύτερης παραγώγου:

$$u(x+h, y) + u(x-h, y) = 2u(x, y) + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} \Delta x^2$$

και

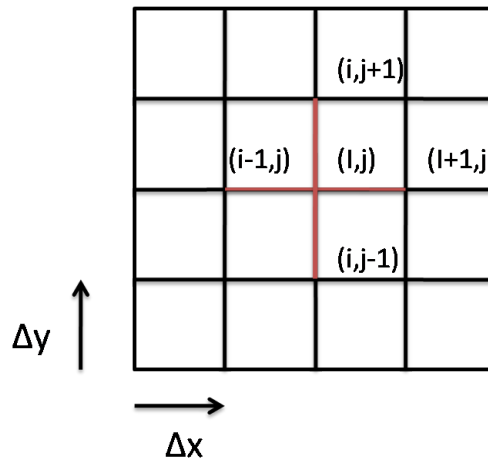
$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} = \frac{u(x+h, y) + u(x-h, y) - 2u(x, y)}{\Delta x^2}$$

Έτσι προκύπτουν οι προσεγγίσεις των δεύτερων παραγώγων για τις μεταβλητές x και y . Οπότε η διακριτοποιημένη μορφή της (2.1) είναι:

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} - \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}$$

για $i = 1, 2, \dots, I - 1$ και $j = 1, 2, \dots, J - 1$, όπου $f_{i,j}$ είναι $f(x_i, y_j)$.

Η παραπάνω εξίσωση ονομάζεται εξίσωση πεπερασμένων διαφορών πέντε σημείων, αφού η καθεμιά από τις αλγεβρικές εξισώσεις που προκύπτουν εμπλέκει την ποσότητα u σε πέντε κόμβους (στον κόμβο (i, j) και στους τέσσερις γειτονικούς $(i \pm 1, j)$ και $(i, j \pm 1)$). Μια σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου απεικονίζεται στο σχήμα 2.2.



Σχήμα 2.2: Αριθμητικό σχήμα της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών.

Η ακρίβεια του αριθμητικού σχήματος είναι 2ης τάξης δηλαδή το τοπικό σφάλμα είναι $O(\Delta x^2) + O(\Delta y^2)$. Από την προσέγγιση των μερικών παραγώγων 2ης τάξης ως προς x και y με κεντρικές διαφορές έχουμε:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2),$$

και αντίστοιχα

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2).$$

Με αντικατάσταση στην εξίσωση Poisson προκύπτει:

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} - \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j} + O(\Delta x^2) + O(\Delta y^2)$$

Τις εξισώσεις αυτές τις κατατάσσουμε στη λεγόμενη φυσική τους διάταξη, θεωρώντας τα σημεία του πλέγματος, στα οποία αντιστοιχούν, πρώτα από αριστερά προς τα δεξιά και ύστερα από κάτω προς τα πάνω [9]. Καθεμιά από τις εξισώσεις έχει τη μορφή

$$2(1 + \beta)u_{i,j} - \beta u_{i,j+1} - u_{i+1,j} - \beta u_{i,j-1} - u_{i-1,j} = \Delta x^2 f_{i,j},$$

όπου $\beta = \frac{\Delta x^2}{\Delta y^2}$, $u_{i,j}$ είναι η προσεγγιστική τιμή της $u(x_i, y_j)$ και $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$. Η συλλογή όλων των εξισώσεων με τη σειρά που προαναφέρθηκε οδηγεί σ' ένα γραμμικό πεπλεγμένο σύστημα της μορφής $Au = b$. Τα στοιχεία του συστήματος σε block μορφή είναι:

$$A = \begin{bmatrix} K & -I & & & & \\ -I & K & -I & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -I & K & -I \\ & & & & -I & K \end{bmatrix},$$

όπου $K = \text{trid}(-\beta, 2(1 + \beta), -\beta)$ και I ο μοναδιαίος πίνακας.

Παρατήρηση: Ο πίνακας A είναι block τριδιαγώνιος, συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

2.2 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων

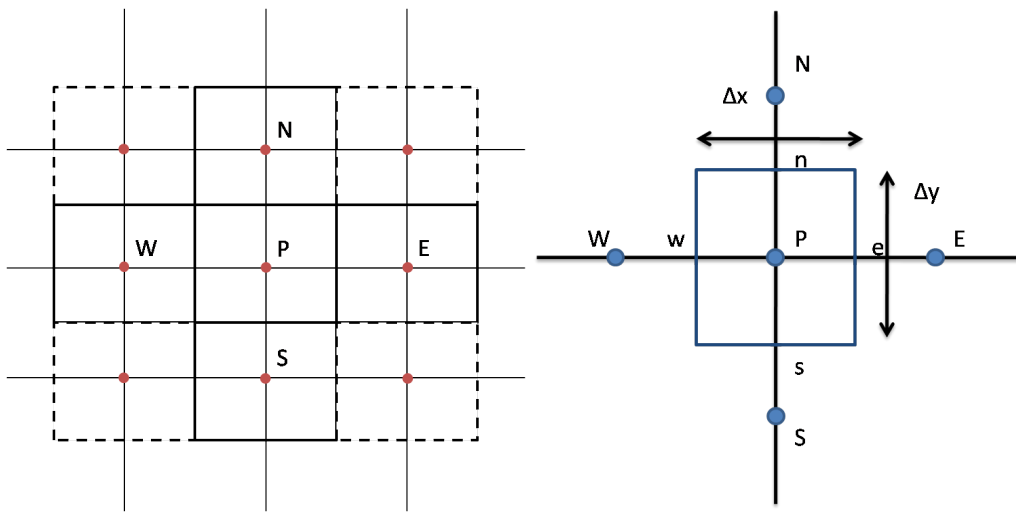
Η μέθοδος διακριτοποίησης των πεπερασμένων όγκων αποτελεί την κύρια μέθοδο διακριτοποίησης για την επίλυση προβλημάτων υπολογιστικής ρευστομηχανικής [5]. Κύρια πλεονεκτήματα της μεθόδου είναι: 1) επειδή είναι ολοκληρωτική μέθοδος υπερτερεί σε σχέση με την μέθοδο των ΠΔ η οποία είναι διαφορική και 2) βρίσκει εφαρμογή σε κάθε τύπο πλέγματος αλλά και σε πολύπλοκες γεωμετρίες.

Η μέθοδος εφαρμόζεται εύκολα χωρίζοντας αρχικά το πεδίο ορισμού σε πεπερασμένους όγκους αναφοράς έτσι ώστε κάθε κόμβος του πλέγματος να περιβάλλεται από έναν όγκο αναφοράς. Στη συνέχεια η ΜΔΕ ολοκληρώνεται στον όγκο αναφοράς. Τα ολοκληρώματα υπολογίζονται αναλυτικά υποθέτοντας ότι οι τιμές της άγνωστης εξαρτημένης μεταβλητής π.χ. η $u(x, y)$ είναι σταθερές ή ότι μεταβάλλονται γραμμικά σε κάθε όγκο αναφοράς. Οι αλγεβρικές εξισώσεις που προκύπτουν ονομάζονται εξισώσεις πεπερασμένων όγκων και το σύστημα επιλύεται χρησιμοποιώντας άμεσες ή επαναληπτικές τεχνικές επίλυσης συστημάτων. Η μεθοδολογία και ο τρόπος διατύπωσης της μεθόδου συνδέεται άμεσα με τη φυσική του προβλήματος και κατ' επέκταση με τη φύση της ΜΔΕ. Θεωρούμε ότι οι εξισώσεις πεπερασμένων όγκων ικανοποιούν τις ίδιες φυσικές αρχές και νόμους, με αυτές που ικανοποιούν οι διαφορικές εξισώσεις από τις οποίες έχουν προκύψει.

Παρατήρηση: Μια βασική διαφορά ανάμεσα στις μεθόδους πεπερασμένων όγκων και διαφορών είναι ότι στις πεπερασμένες διαφορές η λύση βασίζεται μόνο

στις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής στους κόμβους του πλέγματος ενώ στους πεπερασμένους όγκους η λύση βασίζεται όχι μόνο στις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής στους κόμβους αλλά στις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής μέσα στα όρια των στοιχειωδών όγκων αναφοράς (συνεχείς υποθετικές κατανομές ανάμεσα στους κόμβους) [5, 7].

Η σχηματική αναπαράσταση των όγκων αναφοράς για καρτεσιανό δομημένο πλέγμα φαίνεται στο σχήμα 2.3.



Σχήμα 2.3: Σχηματική αναπαράσταση των όγκων αναφοράς για ένα υπολογιστικό πλέγμα και το αριθμητικό σχήμα στον όγκο αναφοράς

Θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο ΠΟ για την επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y). \quad (2.2)$$

Ολοκληρώνοντας την εξίσωση (2.2) έχουμε:

$$-\int_{\Omega} \nabla^2 u = \int_{\Omega} f$$

$$\int_s^n \int_w^e \left(\frac{\partial u^2}{\partial x^2} + \frac{\partial u^2}{\partial y^2} \right) dx dy = - \int_s^n \int_w^e f(x, y) dx dy$$

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial u^2}{\partial x^2} dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial u^2}{\partial y^2} dx dy = - \int_s^n \int_w^e f(x, y) dx dy \quad (2.3)$$

Αρχικά υπολογίζουμε:

$$\begin{aligned} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx dy &= \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) dx dy = \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) dx \int_s^n dy = \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_w^e \Delta y = \\ &= \left[\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_w \right] \Delta y = \left(\frac{u_E - u_P}{\Delta x} - \frac{u_P - u_W}{\Delta x} \right) \Delta y = \frac{u_E - 2u_P + u_W}{\Delta x} \Delta y \end{aligned}$$

Στη συνέχεια υπολογίζουμε :

$$\begin{aligned} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} dx dy &= \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) dy dx = \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) dy \int_w^e dx = \left[\frac{\partial u}{\partial y} \right]_s^n \Delta x = \\ &= \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_s \right] \Delta x = \left(\frac{u_N - u_P}{\Delta y} - \frac{u_P - u_S}{\Delta y} \right) \Delta x = \frac{u_N - 2u_P + u_S}{\Delta y} \Delta x \end{aligned}$$

Με αντικατάσταση στην (2.3) έχουμε:

$$\frac{u_E - 2u_P + u_W}{\Delta x} \Delta y + \frac{u_N - 2u_P + u_S}{\Delta y} \Delta x = -f(x, y) \Delta x \Delta y + O(\Delta x^2) + O(\Delta y^2) \quad (2.4)$$

Θέτοντας $\alpha = \frac{\Delta y}{\Delta x}$, $\frac{1}{\alpha} = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ και $\gamma = \Delta x \Delta y$ η εξίσωση στην γενική της μορφή γίνεται:

$$2\left(\frac{\alpha^2 + 1}{\alpha}\right)u_P - \alpha u_E - \alpha u_W - \frac{1}{\alpha}u_N - \frac{1}{\alpha}u_S = -\gamma f$$

όπου $u_P = u_{i,j}$, $u_E = u_{i+1,j}$, $u_W = u_{i-1,j}$, $u_N = u_{i,j+1}$ και $u_S = u_{i,j-1}$. Τα στοιχεία του συστήματος όταν αυτά γραφτούν σε block μορφή είναι:

$$A = \begin{bmatrix} P & -\frac{1}{\alpha}I & & & & \\ -\frac{1}{\alpha}I & P & -\frac{1}{\alpha}I & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\frac{1}{\alpha}I & P & -\frac{1}{\alpha}I \\ & & & -\frac{1}{\alpha}I & P & \\ & & & & & & \end{bmatrix},$$

όπου $P = \text{trid}\left(-\alpha, 2\left(\frac{\alpha^2 + 1}{\alpha}\right), -\alpha\right)$ και I ο μοναδιαίος πίνακας.

Παρατήρηση: Ο πίνακας A είναι block τριδιαγώνιος, συμμετρικός και θετικά ορισμένος όπως και στην περίπτωση της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών.

2.3 Τανυστικά γινόμενα

Για να δομήσουμε εύκολα τον παραπάνω πίνακα εισάγουμε την έννοια του τανυστικού γινομένου πινάκων [9].

Ορισμός : Τανυστικό γινόμενο ή γινόμενο Kronecker μεταξύ δυο πινάκων A και B διάστασης $n_1 \times m_1$ και $n_2 \times m_2$ αντίστοιχα, ορίζεται ο πίνακας C , διάστασης $n_1 n_2 \times m_1 m_2$ που συμβολίζεται με $A \otimes B$ και είναι:

$$C = A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

Βασικές ιδιότητες: Με βάση τον ορισμό που μόλις δόθηκε μπορούν να αποδειχθούν οι παρακάτω ιδιότητες:

1. $(A + C) \otimes B = A \otimes B + C \otimes B$
2. $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$
3. $(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$
4. $(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$
5. Αν $Au = \lambda u$ και $Bv = \mu v$ τότε $(A \otimes B)(u \otimes v) = (\lambda\mu)(u \otimes v)$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας A των συντελεστών του συστήματος που προκύπτει από την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων όγκων έχει άμεση σχέση με τον πίνακα $T = \text{trid}(-b, 1 + b, -b)$ της μονοδιάστατης εφαρμογής. Συγκεκριμένα ο πίνακας A στην παρούσα περίπτωση μπορεί να γραφεί σε block μορφή ως εξής:

$$A = \begin{bmatrix} 2I + T & -I & & & & \\ -I & 2I + T & -I & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -I & 2I + T & -I \\ & & & & -I & 2I + T \end{bmatrix},$$

όπου $T = \text{trid}(-b, 1 + b, -b)$ και I ο μοναδιαίος πίνακας. Με βάση τον ορισμό του τανυστικού γινομένου μπορούμε να διαπιστώσουμε από την παραπάνω μορφή του A ότι:

$$A = I \otimes T + T \otimes I \quad (2.5)$$

Παρατήρηση: Η παράσταση του πίνακα A με τανυστικά γινόμενα βάση της σχέσης (2.5), βοηθάει αφ' ενός στη θεωρητική μελέτη των ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα A και αφετέρου στους υπολογισμούς, όπως ορίζει ο αλγόριθμος της κάθε επαναληπτικής μεθόδου, στις οποίες θα αναφερθούμε στο επόμενο κεφάλαιο. Στην παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκε το Matlab (MathWorks, Natick, MA, US, version R2013a).

Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης αλγεβρικών συστημάτων της μορφής $Ax = b$, όπου ο πίνακας A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Αναφορά επίσης γίνεται σε μη-γραμμικά συστήματα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΑΛΓΕΒΡΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

3.1 Εισαγωγή

Η αριθμητική επίλυση ενός προβλήματος με τις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών και όγκων αλλά και άλλων αριθμητικών μεθόδων διακριτοποίησης ΜΔΕ καταλήγουν σ' ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Η μέθοδος επίλυσης εξαρτάται από την φύση του προβλήματος. Οι άμεσες μέθοδοι στα πολύ μεγάλα συστήματα δεν προτιμώνται λόγω του σφάλματος στρογγύλευσης, της μειωμένης ταχύτητας και του μεγάλου ποσού μνήμης που απαιτείται. Για την επίλυση αυτών των γραμμικών συστημάτων εφαρμόζονται επαναληπτικές μέθοδοι οι οποίες έχουν περισσότερες δυνατότητες σε σχέση με τις άμεσες μεθόδους όπως μικρότερο υπολογιστικό κόστος, ικανοποιητική μνήμη και εκτελούνται πιο γρήγορα. Η υπεροχή τους βασίζεται στο γεγονός ότι οι περισσότερες επαναληπτικές μέθοδοι αξιοποιούν τα δυο βασικά χαρακτηριστικά των συστημάτων που προκύπτουν από την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και των πεπερασμένων όγκων. Στα συστήματα στα οποία καταλήγουμε ο πίνακας A του συστήματος είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, και block τριδιαγώνιος [9].

Οι περισσότερες επαναληπτικές μέθοδοι βασίζονται στην διατύπωση αναγωγικών τύπων επαναληπτικού χαρακτήρα. Ένας γενικός αλγόριθμος για μια επαναληπτική μέθοδο είναι ο εξής:

- Ξεκινάμε με μια αρχική προσέγγιση x_0 της πραγματικής λύσης x , του γραμμικού συστήματος, $Ax = b$.
- Παράγουμε μια ακολουθία λύσεων $\{x_{n+1}\}_{n=0}^{\infty}$ που υπολογίζεται συνήθως από έναν τύπο της μορφής

$$x_{n+1} = Bx_n + c, n = 1, 2, 3, \dots,$$

όπου ο πίνακας B διαφέρει ανάλογα με την επαναληπτική μέθοδο που χρησιμοποιούμε.

Σε αυτή την εργασία ασχοληθήκαμε με την μέθοδο απότομης καθόδου, Steepest Decsent Method, την μέθοδο των συζυγών κλίσεων, Conjugate Gradient Method, και την γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων, Generalized Minimal Residual Method ή GMRES. Οι μέθοδοι αυτοί ανήκουν στην κατηγορία των μη στατικών μεθόδων οι οποίες είναι ελάχιστα πιο πολύπλοκες από τις στατικές αλλά με αρκετά μεγάλη αποτελεσματικότητα.

Πιο συγκεκριμένα, στις στατικές επαναληπτικές μεθόδους οι υπολογισμοί εμπλέκουν πληροφορίες οι οποίες είναι σταθερές σε κάθε επαναληπτικό βήμα. Αντίθετα, στις μη-στατικές, οι πληροφορίες μεταβάλλονται και επιπλέον οι διάφορες σταθερές που εμφανίζονται υπολογίζονται κυρίως με εσωτερικά γινόμενα υπολοίπων σφαλμάτων ή γενικότερα διανυσμάτων που προκύπτουν σε κάθε επαναληπτικό βήμα [10].

Παρατήρηση: Ο ρυθμός με τον οποίο συγκλίνει μια επαναληπτική μέθοδος εξαρτάται κυρίως από το φάσμα (σύνολο ιδιοτιμών) του πίνακα A των συντελεστών του συστήματος, $Ax = b$.

3.2 Μέθοδος απότομης καθόδου

Η μέθοδος απότομης καθόδου, Steepest Decsent Method είναι μια από τις παλαιότερες και περισσότερο διαδεδομένες μεθόδους βελτιστοποίησης συναρτήσεων πολλών μεταβλητών. Αποτέλεσε τη βάση για άλλες μεθόδους οι οποίες τροποποιώντας την, έχουν ως αποτέλεσμα ταχύτερη σύγκλιση. Η βασική ιδέα οφείλεται στον Cauchy (1817) και στηρίζεται στο γεγονός ότι το διάνυσμα της κλίσης της $f(x)$, σε κάθε σημείο x , είναι ένα διάνυσμα στη διεύθυνση της μεγαλύτερης τοπικής αύξησης της $f(x)$. Βασίζεται στην ισοδυναμία ανάμεσα στη λύση ενός γραμμικού συστήματος και την ελαχιστοποίηση τετραγωνικής συνάρτησης. Θα παρουσιάσουμε τη μέθοδο της απότομης καθόδου (Steepest Decsent Method) για την επίλυση ενός συστήματος $Ax = b$, όπου $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, είναι ένας θετικά ορισμένος πίνακας και x, b διανύσματα του \mathbb{R}^n . Επιλέγουμε μια συνάρτηση τετραγωνικής μορφής :

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c,$$

όπου c μια σταθερά. Η επιλογή της μορφής της $f(x)$ δικαιολογείται από την παρακάτω πρόταση [9].

Θεώρημα: Έστω το γραμμικό σύστημα $Ax = b$, $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $A^T = A$, A θετικά ορισμένος, $b \in \mathbb{R}^n$, και η συνάρτηση

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c.$$

Τότε η λύση του συστήματος ($x^* = A^{-1}b$) είναι το σημείο στο οποίο η τιμή της $f(x)$ ελαχιστοποιείται.

Απόδειξη. Έστω $x = x^* + y$, $y \in \mathbb{R}^n$, τότε αφού λάβουμε υπόψη τις ιδιότητες του πίνακα A , η τιμή της $f(x)$ γίνεται:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^* + y) = \frac{1}{2}(A(x^* + y), x^* + y) - (b, x^* + y) \\ &= \frac{1}{2}(Ax^*, x^*) + \frac{1}{2}(Ax^*, y) + \frac{1}{2}(Ay, x^*) + \frac{1}{2}(Ay, y) - (b, x^*) - (b, y) \\ &= f(x^*) + (Ax^* - b, y) + \frac{1}{2}(Ay, y) = f(x^*) + \frac{1}{2}(Ay, y) \geq f(x^*) \end{aligned}$$

Το “=” ισχύει αν και μόνο αν $y = 0$, δηλαδή αν και μόνο αν $x = x^*$. □

Δηλαδή η λύση του $Ax = b$ είναι κρίσιμο σημείο της $f(x)$. Επειδή ο A είναι θετικά ορισμένος η λύση αυτή αποτελεί το ελάχιστο της $f(x)$ και έτσι το γραμμικό σύστημα $Ax = b$, μπορεί να λυθεί βρίσκοντας το x που ελαχιστοποιεί την $f(x)$.

Επομένως οι μέθοδοι της απότομης καθόδου και κατ' επέκταση των συζυγών κλίσεων καλούνται να επιλύσουν το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της τετραγωνικής μορφής $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c$. Πιο συγκεκριμένα στη μέθοδο της απότομης καθόδου ξεκινάμε μ' ένα τυχαίο σημείο, $x^{(0)}$. Εκτελούμε μια σειρά βημάτων $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$, έως ότου φτάσουμε κοντά στη λύση x . Όταν εκτελούμε ένα βήμα επιλέγουμε εκείνη τη διεύθυνση στην οποία η f ελαττώνεται γρηγορότερα και είναι αντίθετη της κλίσης, $-\nabla f(x^{(k)})$. Οπότε η διεύθυνση είναι $-\nabla f(x^{(k)}) = b - Ax^{(k)}$. Η κλίση μας δείχνει την κατεύθυνση της μέγιστης αύξησης της συνάρτησης $f(x)$ μηδενίζοντας την κλίση της. Το σφάλμα $e^{(k)} = x^{(k)} - x$, είναι ένα διάνυσμα στο τέλος της k -επανάληψης που μας υποδεικνύει πόσο απέχουμε από τη λύση, όπου $x^{(k)}$ είναι η λύση μετά την k επανάληψη και x η ακριβής λύση. Το υπόλοιπο, $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ μας δείχνει πόσο απέχουμε από την πραγματική τιμή του διανύσματος b . Είναι φανερό ότι $r^{(k)} = -Ae^{(k)}$, καθώς επίσης και ότι $r^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$. Ως κριτήριο σύγκλισης μπορεί να ληφθεί ότι η ευκλείδια νόρμα του υπολοίπου είναι: $\|r^{(k)}\|_2 \leq \varepsilon$ όπου ε επιθυμητό φράγμα του σφάλματος και ως αρχική προσέγγιση παίρνουμε το $x^{(0)} = 0$.

Σημείωση: Ο ορισμός για την Ευκλείδια νόρμα είναι:

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = (x, x)_2^{\frac{1}{2}}$$

Οι διανυσματικές νόρμες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να μετρήσουμε τη σύγκλιση μιας ακολουθίας διανυσμάτων, με την έννοια ότι η επιλογή της νόρμας επηρεάζει την ταχύτητα σύγκλισης. Σε χώρους πεπερασμένης διάστασης, έχει αποδειχθεί ότι η σύγκλιση δεν επηρεάζεται από τη νόρμα που επιλέγεται. Γενικά σε προβλήματα βελτιστοποίησης χρησιμοποιείται η Ευκλείδεια νόρμα επειδή είναι συνεχώς διαφορίσιμη (εκτός από την αρχή των αξόνων).

3.2.1 Αλγόριθμος μεθόδου απότομης καθόδου

Με δεδομένα ότι: $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $A^T = A$, A θετικά ορισμένος, $b \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ το επιθυμητό σφάλμα,

$$x^{(0)} = 0$$

$$r^{(0)} = b$$

$$k = 0$$

Εφόσον $\|r^{(k)}\| > \varepsilon$

$$k = k + 1$$

$$a_k = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Ar^{(k-1)}, r^{(k-1)})}$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + ar^{(k-1)}$$

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

Τέλος “Εφόσον”

Αποτέλεσμα: $x = x^{(k)}$ η προσέγγιση της λύσης.

Παρατήρηση: Ο παραπάνω αλγόριθμος απαιτεί δυο πολλαπλασιασμούς πίνακα επί διάνυσμα σε κάθε επανάληψη. Το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου Απότομης Καθόδου εξαρτάται από τα γινόμενα πίνακα με διάνυσμα. Οι δυο αυτοί πολλαπλασιασμοί μπορούν να αναχτούν σε έναν.

3.2.2 Σύγκλιση της μεθόδου απότομης καθόδου

Για να ορίσουμε τη σύγκλιση της μεθόδου Απότομης Καθόδου θα πρέπει να ορίσουμε τη νόρμα ενέργειας ή energy norm, $\|e^{(k)}\|_{A^{\frac{1}{2}}} = (Ax, x)^{\frac{1}{2}}$. Η ελαχιστοποίηση της νόρμας $\|e^{(k)}\|_{A^{\frac{1}{2}}}$ είναι ισοδύναμη με την ελαχιστοποίηση της $f(x^{(k)})$.

Το θεώρημα που ακολουθεί είναι το κριτήριο σύγκλισης της μεθόδου απότομης καθόδου [9].

Θεώρημα: Έστω $x^{(k)}$, $k \geq 0$, η ακολουθία που παράγεται από τον αλγόριθμο της μεθόδου της απότομης καθόδου για οποιοδήποτε $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ και έστω x η ακριβής λύση του συστήματος $Ax = b$, όπου ο $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Έστω, $\kappa = \kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$, ο δείκτης κατάστασης του πίνακα A ως προς την ευκλείδια νόρμα, όπου λ_{\max} και λ_{\min} η μέγιστη και η ελάχιστη ιδιοτιμή του A , αντίστοιχα. Αν $e^{(k)} = x^{(k)} - x$ είναι το διάνυσμα-σφάλμα στην k -επανάληψη τότε αποδεικνύεται ότι:

$$\|e^{(k)}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \leq \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right)^k \|e^{(0)}\|_{A^{\frac{1}{2}}}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Παρατήρηση 1: Η απόδειξη μπορεί να αναζητηθεί στο βιβλίο Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα των Β. Δουγαλή, Δ. Νούτσο, Α. Χατζηδήμο [9].

Παρατήρηση 2: Η μέθοδος της απότομης καθόδου κατά κανόνα συγχλίνει πολύ αργά, μπορεί όμως να συγχλίνει γρηγορότερα εάν η επιλογή του αρχικού σημείου είναι καλή. Επίσης όσο μεγαλύτερος είναι ο δείκτης κατάστασης $\kappa_2(A)$, τόσο βραδύτερη θα είναι η σύγκλιση.

3.3 Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων

Η μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient Method) αποτελεί βελτίωση μιας γενικότερης μεθόδου, της μεθόδου Συζυγών Κατευθύνσεων. Πρόκειται για μια μέθοδο συζυγών κατευθύνσεων κατά την οποία επιλέγονται ως διανύσματα κατεύθυνσης τα διαδοχικά διανύσματα υπόλοιπο. Στη μέθοδο Συζυγών κλίσεων για την εύρεση της νέας διεύθυνσης $p^{(k)}$ χρειάζεται μόνο η προηγούμενη διεύθυνση $p^{(k-1)}$ και όχι οι προηγούμενες διευθύνσεις όπως στη μέθοδο συζυγών κατευθύνσεων. Η διαδικασία ελαχιστοποίησης πραγματοποιείται σε μια σειρά διανυσματικών υποχώρων V_k , με συνεχώς αυξανόμενη διάσταση [9, 10].

3.3.1 Αλγόριθμος μεθόδου Συζυγών Κλίσεων

Δεδομένα: $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $A^T = A$, A θετικά ορισμένος, $b \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ το επιθυμητό σφάλμα.

$$x^{(0)} = 0$$

$$r^{(0)} = b$$

$$p^{(1)} = r^{(0)}$$

$$a_1 = \frac{(r^{(0)}, r^{(0)})}{(Ap^{(1)}, p^{(1)})}$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} + a_1 p^{(1)}$$

$$r^{(1)} = b - Ax^{(1)} (= r^{(0)} - a_1 Ap^{(1)})$$

$$k = 1$$

Εφόσον $\|r^{(k)}\| > \varepsilon$ και $k < n$,

$$k = k + 1$$

$$\beta_k = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(r^{(k-2)}, r^{(k-2)})}$$

$$p^{(k)} = r^{(k-1)} + \beta_k p^{(k-1)}$$

$$a_k = \frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + a_k p^{(k)}$$

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)} (= r^{(k-1)} - a_k Ap^{(k)})$$

Τέλος “Εφόσον”

Αποτέλεσμα: $x = x^{(k)}$ η προσέγγιση της λύσης.

3.3.2 Σύγκλιση της μεθόδου Συζυγών Κλίσεων

Η μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων χρησιμοποιείται ευρέως για προβλήματα που δίνουν μεγάλης κλίμακας γραμμικά συστήματα και δεν είναι εφικτό να δίνει τη λύση ακόμα και σε n επαναλήψεις. Συγκλίνει στη βέλτιστη λύση μετά από n επαναλήψεις. Στην πράξη όμως, εξαιτίας των σφαλμάτων που προκύπτουν λόγω των αριθμητικών υπολογισμών χάνεται η A -ορθογωνιότητα των διανυσμάτων αναζήτησης. Το παρακάτω θεώρημα είναι το θεώρημα σύγκλισης της μεθόδου [9].

Θεώρημα: Έστω $x^{(k)}$, $k \geq 0$, η ακολουθία που παράγεται από τον αλγόριθμο της μεθόδου συζυγών κλίσεων για οποιοδήποτε $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ και έστω x η λύση του συστήματος $Ax = b$, όπου ο $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Έστω $\kappa = \kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$, όπου λ_{\max} και λ_{\min} η μέγιστη και η ελάχιστη ιδιοτιμή του A , αντίστοιχα. Αν $e^{(k)} = x^{(k)} - x$ είναι το διάνυσμα-σφάλμα στην k -επανάληψη τότε:

$$\|e^{(k)}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \leq 2 \left[\left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k + \left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^k \right]^{-1} \|e^{(0)}\|_{A^{\frac{1}{2}}}, k = 1(1)n - 1$$

Παρατήρηση 1: Στην πράξη η μέθοδος συζυγών κλίσεων συγκλίνει γρηγορότερα για προβλήματα με καλή κατάσταση. Η σύγκλιση της μεθόδου είναι γρηγορότερη από αυτή της απότομης καθόδου. Ενώ θεωρητικά, η μέθοδος συζυγών κλίσεων βρίσκει ακριβώς τη λύση σε n επαναλήψεις, για προβλήματα με καλή κατάσταση η μέθοδος συζυγών κλίσεων θα συγκλίνει πολύ κοντά στη λύση, πολύ πιο πριν από n επαναλήψεις. Επιπλέον, η σύγκλιση της μεθόδου επιτυγχάνεται, σε λιγότερες επαναλήψεις αν οι ιδιοτιμές είναι σχετικά συγκεντρωμένες σε μικρό διάστημα $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, μακριά από το μηδέν.

Παρατήρηση 2: Από το θεώρημα σύγκλισης της μεθόδου των συζυγών κλίσεων παρατηρούμε ότι η A -νόρμα του σφάλματος της μεθόδου συζυγών κλίσεων φράσσεται από έναν όρο που είναι αύξουσα συνάρτηση του δείκτη κατάστασης. Επομένως για να ελαχιστοποιήσουμε το φράγμα αυτό θα πρέπει κατά κάποιον τρόπο να ελαχιστοποιήσουμε τον δείκτη κατάστασης του πίνακα συντελεστή του συστήματός μας, $A \in \mathbb{R}^{n,n}$. Αυτό επιτυγχάνεται με προρρύθμιση του πίνακα A όπως θα δούμε παρακάτω.

Παρατήρηση 3: Αφού ο πίνακας A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, ο δείκτης κατάστασης δίνεται από τη σχέση, $\kappa = \kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$. Έτσι θα πρέπει να ελαχιστοποιήσουμε το λόγο της μέγιστης προς την ελάχιστη ιδιοτιμή του πίνακα A .

3.3.3 Πολυπλοκότητα της μεθόδου Συζυγών Κλίσεων

Οι πράξεις που κυριαρχούν κατά τη διάρκεια των επαναλήψεων, τόσο στη μέθοδο της απότομης καθόδου όσο και στη μέθοδο συζυγών κλίσεων είναι τα γινόμενα πίνακα με διάνυσμα. Μέσα από μια διαδικασία Gram-Schmidt κατανοούμε ότι δεν χρειάζεται να αποθηκεύσουμε τα προηγούμενα διανύσματα αναζήτησης για να εξασφαλίσουμε την A -ορθογωνιότητα των νέων διανυσμάτων αναζήτησης. Αυτό

δείχνει το πλεονέκτημα της μεθόδου συζυγών κλίσεων, διότι η πολυπλοκότητα μειώνεται ανά επανάληψη από $O(n^2)$ σε $O(m)$. Γενικά ένας πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα απαιτεί $O(m)$ πράξεις όπου m είναι ο αριθμός των μη μηδενικών στοιχείων του πίνακα A και n η διάσταση του πίνακα. Σε πολλά προβλήματα ο πίνακας A είναι αραιός και $m = O(n)$. Στη μέθοδο συζυγών κλίσεων η πολυπλοκότητα χρόνου είναι $O(m\sqrt{\kappa})$, όπου κ ο δείκτης κατάστασης του πίνακα [9, 10].

Συμπέρασμα: Το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η μέθοδος συζυγών κλίσεων είναι σαφώς αποτελεσματικότερη έναντι των άλλων επαναληπτικών μεθόδων λόγω της ταχύτερης σύγκλισης και της μικρότερης πολυπλοκότητάς χρόνου.

3.4 Γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων

Η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων (Generalized Minimal Residual Method, GMRES) αναπτύχθηκε από τους Yousef Saad και Martin Shultz το 1986. Είναι μια πιο γενικευμένη μέθοδος από την MINRES που είχε δημιουργηθεί το 1975 από τους Chris Paige και Michael Saunders [11, 12]. Είναι σχεδιασμένη για την επίλυση μη συμμετρικών γραμμικών συστημάτων. Βασίζεται σε μια τροποποιημένη Gram-Schmidt διαδικασία και χρησιμοποιεί επανεκκινήσεις για τον έλεγχο των αποθηκευτικών απαιτήσεων. Στην περίπτωση που δεν χρησιμοποιεί επανεκκινήσεις θα συγκλίνει σε n το πολύ βήματα, όπου n είναι το μέγεθος του συστήματος. Για αρκετά μεγάλο n , η χρήση της μεθόδου χωρίς επανεκκινήσεις δεν ενδείκνυται λόγω του φόρτου υπολογισμών και των αποθηκευτικών απαιτήσεων. Ο προσδιορισμός του σημείου επανεκκίνησης είναι το πιο κρίσιμο σημείο κατά τη χρήση αυτής της μεθόδου [13].

Ορισμός: Ένας υπόχωρος Krylov τάξης r παράγεται από έναν $n \times n$ πίνακα, A και ένα διάνυσμα b διάστασης n ως ο υποχώρος του \mathbb{R}^n που παράγεται από τα γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα $b, Ab, A^2b, \dots, A^{r-1}b$ και συμβολίζεται:

$$K_r(A, b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{r-1}b\}. \quad (3.1)$$

Η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων είναι μια μέθοδος προβολής ή μέθοδος Krylov που βασίζεται στη δημιουργία μιας βάσης Krylov. Οι μέθοδοι Krylov αποτελούν τη σημαντικότερη κατηγορία επαναληπτικών μεθόδων επίλυσης γραμμικών συστημάτων.

3.4.1 Περιγραφή της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων

Η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων είναι μια επαναληπτική μέθοδος προβολής που βασίζεται στον υπόχωρο $K = K_m(A, r_0)$ και στις σχέσεις $L = AK_m$ με $v_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|_2}$, όπου $r_0 = b - Ax_0$. Ζητούμενο είναι να βρούμε μια ορθοκανονική βάση $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ του υποχώρου Krylov $K_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{r-1}r_0\}$, όπου για την προσεγγιστική λύση $x^{(k)}$, η οποία έχει βρεθεί στο βήμα k του αλγορίθμου ως $x^{(k)} = x^{(k-1)} + y^{(k)}v_k$, ισχύει $b - Ax^{(k)} \perp \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{r-1}r_0\}$ [11, 12].

Η τεχνική ελαχιστοποιεί τη νόρμα του υπολοίπου σε όλα τα διανύσματα στον υποχώρο $x_0 + K_m$. Προσεγγίζει δηλαδή την λύση αναζητώντας το διάνυσμα που ελαχιστοποιεί τη νόρμα του υπολοίπου. Αφού θα προσεγγίσουμε τη λύση από τον υπόχωρο $K_m(A, r_0)$ θα πρέπει να ξέρουμε μια βάση του. Η βάση αυτή κατασκευάζεται με τη βοήθεια του αλγορίθμου του Arnoldi που περιγράφεται παρακάτω.

Αλγόριθμος του Arnoldi

Για την κατασκευή - εύρεση της ορθοκανονικής βάσης του υποχώρου Krylov K_m χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος του Arnoldi ο οποίος παρουσιάζεται παρακάτω:

1. Επιλογή ενός διανύσματος v_1 , τέτοιο ώστε $\|v_1\|_2 = 1$
2. Για $j = 1, 2, \dots, m$ επανάλαβε:
 - (α) Υπολογισμός του $h_{ij} = (Av_j, v_i)$ για $j = 1, 2, \dots, j$
 - (β) Υπολογισμός του $w_j := Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$
 - (γ) $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
 - (δ) Αν $h_{j+1,j} = 0$ τότε τέλος διαδικασίας
 - (ε) $v_{j+1} = \frac{w_j}{h_{j+1,j}}$
3. Τέλος επανάληψης

Σε κάθε βήμα ο αλγόριθμος του Arnoldi πολλαπλασιάζει το προηγούμενο διάνυσμα v_j με τον πίνακα A και μετά ορθοκανονικοποιεί το διάνυσμα που προκύπτει w_j , ως προς τα προηγούμενα διανύσματα v_i με μια διαδικασία ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt ($w_j := Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$). Ο αλγόριθμος σταματάει όταν

το διάνυσμα w_j εξαφανιστεί, δηλαδή αν ισχύει $\|w_j\|_2 = 0$. Σ' αυτήν την περίπτωση το διάνυσμα v_{j+1} , δεν μπορεί να υπολογιστεί και επομένως ο αλγόριθμος σταματάει.

Σύμφωνα με τον αλγόριθμο Arnoldi ορίζεται ο πίνακας V_m , διαστάσεων $n \times m$, που περιέχει τα διανύσματα στήλης v_1, v_2, \dots, v_m , ο Hessenberg πίνακας, \bar{H}_m , διαστάσεων $(m+1) \times m$, του οποίου τα μη μηδενικά στοιχεία h_{ij} , ορίζονται από τον αλγόριθμο και ο πίνακας H_m , που προκύπτει από την αφαίρεση της τελευταίας γραμμής από τον πίνακα \bar{H}_m .

Αλγόριθμος της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων

Ο αλγόριθμος της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων βασίζεται στο παρακάτω θεώρημα [11, 13].

Θεώρημα: Έστω $\tilde{x} \in x_0 + K_m$ η λύση που δίνει η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων. Ισχύει ότι, $\|b - A\tilde{x}\|_2 = \min_{x \in x_0 + K_m} \|b - Ax\|_2$. Δηλαδή η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων ελαχιστοποιεί την ευκλείδεια νόρμα του υπολοίπου $b - A\tilde{x}$ πάνω στο χώρο $x_0 + K_m$.

Συνδυάζοντας τον αλγόριθμο του Arnoldi μαζί με το παραπάνω θεώρημα προκύπτει ο αλγόριθμος της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων:

1. Υπολογισμός των $r_0 = b - Ax_0$, $\beta := \|r_0\|_2$, και $v_1 := \frac{r_0}{\beta}$
2. Για $j = 1, 2, \dots, m$ επανάλαβε:
 - (α') Υπολογισμός του $w_j := Av_j$
 - (β') Για $i = 1, 2, \dots, j$ επανάλαβε:
 - i. $h_{ij} := (w_j, v_i)$
 - ii. $w_j := w_j - h_{ij}v_i$
 - (γ') Τέλος Επανάληψης
 - (δ') $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ Αν $h_{j+1,j} = 0$ τότε $m := j$ και Τέλος διαδικασίας
 - (ε') $v_{j+1} = \frac{w_j}{h_{j+1,j}}$
3. Τέλος Επανάληψης
4. Ορισμός του πίνακα Hessenberg διαστάσεων $(m+1) \times m$,

$$\bar{H}_m = \{h_{ij}\}_{1 \leq i \leq m+1, 1 \leq j \leq m}$$

5. Υπολογισμός του y_m που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ και της νέας προσεγγιστικής λύσης $x_m = x_0 + V_m y_m$.

3.4.2 Πολυπλοκότητα της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων

Το μεγαλύτερο μειονέκτημα της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων είναι ότι το πλήθος των υπολογισμών αλλά και ο χώρος αυξάνονται σχεδόν γραμμικά με τον αριθμό των επαναλήψεων. Το συνολικό υπολογιστικό κόστος του αλγορίθμου είναι της τάξης $O(k^2)n$ και ένα βήμα της μεθόδου κοστίζει περίπου $O(k)n$ πράξεις, όπου k ο αριθμός των επαναλήψεων και n η διάσταση του συστήματος. Για την αποφυγή του μεγάλου αυτού κόστους γίνεται επανεκκίνηση της μεθόδου έπειτα από επιλεγμένο αριθμό επαναλήψεων. Τα αποθηκευμένα δεδομένα καθαρίζονται και τα αποτελέσματα της k -οστής επανάληψης χρησιμοποιούνται ως αρχική τιμή για τις επόμενες k -επαναλήψεις. Από την άλλη πλευρά η μέθοδος έχει μεγάλα πλεονεκτήματα με κύριο το γεγονός ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε μη συμμετρικά γραμμικά συστήματα σε αντίθεση με τις άλλες μεθόδους [13].

Σημείωση: Δεν μπορούμε να ξέρουμε εκ των προτέρων τη βέλτιστη τιμή του k η οποία εξαρτάται από το πρόβλημα που έχουμε να λύσουμε (τον πίνακα των συντελεστών A) καθώς και από την υπολογιστική ισχύ (μνήμη) που έχουμε στη διάθεσή μας. Αν το k επιλεγεί μικρό τότε η μέθοδος θα έχει πολύ αργή σύγκλιση ή η σύγκλιση θα αποτύχει. Αν το k είναι μεγαλύτερο απ' όσο απαιτείται, η μέθοδος θα εκτελέσει περιττούς υπολογισμούς και θα χρησιμοποιήσει περισσότερο χώρο απ' όσο απαιτείται.

3.4.3 Σύγκλιση της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων

Θεώρημα: Έστω x_m η προσεγγιστική λύση που δίνει η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων στην m επανάληψη. Ορίζουμε $r_m = b - Ax_m$ το υπόλοιπο (residual) της μεθόδου. Τότε η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων συγκλίνει μονότονα υπό την έννοια ότι: $\|r_{m+1}\|_2 \leq \|r_m\|_2$.

Γενικά μπορούμε να πούμε ότι η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων συγκλίνει ασυμπτωτικά ταχύτερα όσο μικρότερο είναι το χωρίο των ιδιοτιμών του πίνακα A και όσο πιο μακριά βρίσκεται το 0 από το κέντρο του διαστήματος των ιδιοτιμών. Η μέθοδος συγκλίνει το μέγιστο δυνατό σε n βήματα [14].

3.5 Προρρύθμιση Γραμμικών συστημάτων

Η χρήση προρρυθμιστή για τις διάφορες επαναληπτικές μεθόδους είναι σημαντική για τη βελτίωση της ταχύτητας σύγκλισης αυτών. Η ανάγκη για τη χρήση προρρυθμιστή προέρχεται από το γεγονός ότι η ταχύτητα σύγκλισης της επαναληπτικής μεθόδου και ειδικότερα των συζυγών κλίσεων εξαρτάται από τις ιδιότητες του φάσματος των ιδιοτιμών [9, 10]. Η προρρύθμιση δεν είναι τίποτε άλλο παρά η μετατροπή του αρχικού μας συστήματος σε ένα νέο σύστημα που να έχει την ίδια λύση, αλλά είναι πιο εύκολο στην επίλυσή του με κάποια επαναληπτική μέθοδο. Ανάλογα με την προρρύθμιση που επιλέγουμε, εξαρτάται και η αποτελεσματικότητα της μεθόδου που χρησιμοποιούμε. Η μετατροπή αυτή ορίζεται ως προρρύθμιση (preconditioning) και ως προρρυθμιστής (preconditioner) ορίζεται ο πίνακας ο οποίος επιτυγχάνει τη μετατροπή αυτή. Επειδή η ταχύτητα σύγκλισης είναι άξουσα συνάρτηση του δείκτη κατάστασης προσπαθούμε να βελτιώσουμε τον δείκτη κατάστασης του πίνακα συντελεστών A . Υποθέτουμε ότι ο M είναι ένας συμμετρικός, θετικά ορισμένος πίνακας που προσεγγίζει τον A αλλά αντιστρέφεται ευκολότερα. Το μετασχηματισμένο σύστημα θα είναι της μορφής:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b, \quad A, M \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^n.$$

Εάν $\kappa(M^{-1}A) \ll \kappa(M)$ ή εάν οι ιδιοτιμές του $M^{-1}A$ είναι “καλύτερα” συγκεντρωμένες από αυτές του πίνακα A μπορούμε να λύσουμε το $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ το οποίο θα έχει μικρότερο δείκτη κατάστασης από το αρχικό $Ax = b$. Παρόλο που οι A, M είναι συμμετρικοί και θετικά ορισμένοι πίνακες αυτό δε σημαίνει ότι είναι και ο $M^{-1}A$. Για το λόγο αυτό μετατρέπουμε τον $M^{-1}A$ σε συμμετρικό και θετικά ορισμένο.

Η επιλογή ενός προρρυθμιστή γίνεται με στόχο τη μείωση του υπολογιστικού χρόνου. Ο χρόνος επίλυσης του προρρυθμισμένου συστήματος ο οποίος περιλαμβάνει και το χρόνο κατασκευής και εφαρμογής του προρρυθμιστή M^{-1} , θέλουμε να είναι μικρότερος από το χρόνο επίλυσης του αρχικού συστήματος. Η επιλογή του προρρυθμιστή είναι αρκετά δύσκολη και εξαρτάται από το πρόβλημα που επιλύεται και από την επαναληπτική διαδικασία που επιλέγεται [9].

3.5.1 Κατηγορίες Προρρυθμιστών

Η χρήση προρρυθμιστή για τις διάφορες επαναληπτικές μεθόδους παίζει σημαντικό ρόλο για τη βελτίωση του ρυθμού σύγκλισης των μεθόδων αυτών. Η επιλογή του πίνακα M ο οποίος ονομάζεται προρρυθμιστής (preconditioner), βασίζεται στα παρακάτω κριτήρια:

- Ο πίνακας M να αποτελεί όσο γίνεται καλύτερη προσέγγιση του πίνακα A ,
- Το κόστος κατασκευής του M να είναι σχετικά μικρό κατά τάξη μεγέθους
- Το κόστος της επίλυσης του συστήματος που προκύπτει, να είναι κατά τάξη μεγέθους μικρότερο από το κόστος του αρχικού συστήματος.

Οι πιο συνηθισμένοι προρρυθμιστές είναι αυτοί που παράγονται άμεσα από τον πίνακα A των συντελεστών των αγνώστων του συστήματος. Έτσι μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο **προρρυθμιστής jacobi**. Είναι ο απλούστερος όλων των προρρυθμιστών, αφού επιλέγουμε ο M να είναι ο διαγώνιος πίνακας με στοιχεία τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα A . Το κόστος με την χρήση του προρρυθμιστή αυξάνεται ελάχιστα. Επίσης τα οφέλη που προσφέρει είναι περιορισμένα. Μια βελτίωση του παραπάνω προρρυθμιστή είναι ο **block προρρυθμιστής jacobi**, ο οποίος έχει κι αυτός μικρό κόστος, και δίνει καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με τον απλό προρρυθμιστή jacobi.

Μια από τις πιο γνωστές και ευρείας χρήσης κατηγορίες προρρυθμιστών είναι αυτή που βασίζεται στην τεχνική της **ατελούς παραγοντοποίησης του πίνακα A (Incomplete Factorization)**. Η βασική ιδέα αυτής της τεχνικής είναι να βρεθεί μια καλή προσέγγιση για τους παράγοντες L και U στην παραγοντοποίηση του πίνακα $A = (LU)$. Αυτό που προσπαθούμε να πετύχουμε είναι να χρησιμοποιούμε μη μηδενικά στοιχεία στους προσεγγιστικούς παράγοντες L και U μόνο στις θέσεις που ο πίνακας A έχει μη μηδενικά στοιχεία. Μια άλλη τεχνική, είναι η ατελής παραγοντοποίηση του Cholesky (**Incomplete Cholesky**) που βρίσκει μια προσέγγιση για τον πίνακα L και κατά συνέπεια του γινομένου LL^T της παραγοντοποίησης του Cholesky [10, 11].

3.6 Αριθμητική επίλυση του μη γραμμικού προβλήματος

Στις προηγούμενες ενότητες παρουσιάζονται μέθοδοι για την επίλυση του γραμμικού συστήματος $Ax = b$, που μπορεί να προκύψουν από την διακριτοποίηση μιας ΜΔΕ. Αν έχουμε να λύσουμε μια μη-γραμμική ΜΔΕ τότε η διαδικασία γίνεται πιο περίπλοκη. Σε αυτή την ενότητα θα περιγράψουμε μια αριθμητική μεθοδολογία που συνδυάζει τις επαναληπτικές μεθόδους που αναλύσαμε με μια μέθοδο για την επίλυση μη-γραμμικών συστημάτων.

Έστω η εξίσωση Poisson:

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y, u)$$

όπου η $f(x, y, u)$ είναι μια μη γραμμική συνάρτηση, για παράδειγμα

$$f(x, y, u) = u^2.$$

Εφαρμόζοντας τις μεθόδους Π.Δ. και Π.Ο. καταλήγουμε σε ένα μη γραμμικό και πεπλεγμένο αλγεβρικό σύστημα εξισώσεων της μορφής $A(\mathbf{u})\mathbf{u} = \mathbf{b}$. Για την επίλυση συστημάτων μη γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων, δεν υπάρχουν γενικά αναλυτικές μέθοδοι, γι' αυτό πολλές φορές καταφεύγουμε σε αριθμητικές μεθόδους επίλυσης. Οι επαναληπτικές μέθοδοι που αναπτύχθηκαν προηγουμένως δεν μπορούν να μας οδηγήσουν στη λύση του νέου μη-γραμμικού συστήματος αφού εφαρμόζονται μόνο σε γραμμικά συστήματα.

Για την αριθμητική επίλυση του μη γραμμικού συστήματος θα πρέπει να συνδυάσουμε τις επαναληπτικές μεθόδους που αναπτύχθηκαν πιο πριν σ' αυτό το κεφάλαιο με μια μέθοδο για μη γραμμικά συστήματα όπως είναι η μέθοδος του Νεύτωνα (Newton Method) η οποία είναι η πιο γνωστή και ευρέως διαδεδομένη λόγω της τετραγωνικής της σύγκλισης. Οφείλεται στον Άγγλο Μαθηματικό, Φυσικό και Αστρονόμο Issac Newton (1643-1727) [10].

3.6.1 Περιγραφή της μεθόδου του Νεύτωνα

Αρχικά έχουμε το εξής μη-γραμμικό και συζευγμένο σύστημα:

$$A(\mathbf{u})\mathbf{u} = \mathbf{b}. \quad (3.2)$$

Η μέθοδος του Νεύτωνα υπολογίζει την επόμενη προσέγγιση σύμφωνα με την ακόλουθη επαναληπτική διαδικασία,

$$u^{k+1} = u^k - J^{-1}(u^k)F(u^k) \Leftrightarrow u^{k+1} - u^k = -J^{-1}(u^k)F(u^k) \Leftrightarrow J(u^k)y = -F(u^k),$$

όπου $y = u^{k+1} - u^k$ και $F(u) = A(u)u - b$.

Το τελικό σύστημα που έχουμε να επιλύσουμε είναι το

$$J(u^k)y = -F(u^k), \quad (3.3)$$

όπου u^k είναι η προηγούμενη λύση του συστήματος. Επίσης,

$$J(u) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial u_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial F_n}{\partial u_n} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

είναι ο Ιακωβιανός πίνακας $n \times n$ και $F(u) = (F_1, F_2, \dots, F_n)^T$, το διάνυσμα των εξισώσεων σφάλματος (residual equations,) που προκύπτουν από τη μέθοδο των Π.Δ. ή Π.Ο. για κάθε υπολογιστικό σημείο του πλέγματος. Είναι λοιπόν φανερό ότι απαιτείται η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος σε κάθε επανάληψη, το οποίο αποτελεί ένα μειονέκτημα της μεθόδου [10].

Ορισμός: (Ιακωβιανός πίνακας) Έστω συνάρτηση F καλώς ορισμένη με συνεχείς μερικές παραγώγους σε μια ανοιχτή γειτονιά του \mathbb{R}^n . Ο πίνακας των μερικών παραγώγων της F ονομάζεται Ιακωβιανός πίνακας (Jacobian matrix), συμβολίζεται με $J(u)$ και δίνεται από τη σχέση (3.4).

Πιο αναλυτικά ο πίνακας A που προκύπτει με εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών είναι block τριδιαγώνιος, συμμετρικός και θετικά ορισμένος και περιέχει την άγνωστη συνάρτηση u . Η γενική μορφή του είναι:

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & -I & & & & \\ -I & A_2 & -I & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -I & A_{n-1} & -I \\ & & & & -I & A_n \end{bmatrix},$$

όπου $A_i = \text{trid}(-\beta, 2(1+\beta) - \gamma u_{ij}, -\beta)$, $j = 1, 2, \dots, n$, για κάθε $i = 1, 2, \dots, n$ και I ο μοναδιαίος πίνακας.

Αντίστοιχα ο πίνακας που προκύπτει με εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων όγκων είναι:

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & -\frac{1}{\alpha}I & & & & \\ -\frac{1}{\alpha}I & A_2 & -\frac{1}{\alpha}I & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -\frac{1}{\alpha}I & A_{n-1} & -\frac{1}{\alpha}I \\ & & & & -\frac{1}{\alpha}I & A_n \end{bmatrix},$$

όπου $A_i = \text{trid}(-\alpha, 2\alpha + \frac{2}{\alpha} - \delta u_{ij}, -\alpha)$, $j = 1, 2, \dots, n$, για κάθε $i = 1, 2, \dots, n$ και I ο μοναδιαίος πίνακας.

Για τη μέθοδο Π.Δ. η k -οστή εξίσωση σφάλματος είναι :

$$F_k = [2(\beta + 1) - \gamma u_{ij}] u_{ij} - \beta u_{i+1,j} - \beta u_{i-1,j} - \beta u_{i,j+1} - \beta u_{i,j-1},$$

όπου $\beta = \frac{\Delta x^2}{\Delta y^2}$, και $\gamma = \Delta x^2$ ενώ αντίστοιχα για την μέθοδο Π.Ο. είναι:

$$F_k = \left[2\left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right) - \delta u_{ij} \right] u_{ij} - \alpha u_{i+1,j} - \alpha u_{i-1,j} - \frac{1}{\alpha} u_{i,j+1} - \frac{1}{\alpha} u_{i,j-1}$$

όπου $\alpha = \frac{\Delta y}{\Delta x}$ και $\frac{1}{\alpha} = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ και $\delta = \Delta x \Delta y$.

Το σύστημα (3.2) μπορεί να λυθεί με μια επαναληπτική μέθοδο π.χ. μέθοδο απότομης καθόδου, μέθοδο συζυγών κλίσεων, γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων, οπότε βρίσκουμε ένα νέο y και στη συνέχεια η νέα λύση δίνεται από την έκφραση,

$$u^{k+1} = u^k + y \quad (3.5)$$

Η επαναληπτική διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί όσες φορές απαιτείται, ώστε να επιτευχθεί η ζητούμενη ακρίβεια, για παράδειγμα έως ότου $\|y\|_2 \leq \varepsilon$, όπου ε είναι μια δοθείσα επιθυμητή ακρίβεια (σταθερά σύγκλισης).

3.6.2 Πλεονεκτήματα - Μειονεκτήματα της μεθόδου του Νεύτωνα

Το μεγάλο πλεονέκτημα της μεθόδου του Νεύτωνα το οποίο την κάνει να υπερτερεί έναντι των άλλων μεθόδων επίλυσης μη γραμμικών συστημάτων, είναι η τετραγωνική της σύγκλιση, η οποία επιτυγχάνεται όταν υπάρχει καλή αρχική προσέγγιση και ο Ιακωβιανός πίνακας είναι αντιστέψιμος. Γενικά η σύγκλιση της μεθόδου εξαρτάται από την αρχική προσέγγιση και δε συγκλίνει για οποιαδήποτε αρχική τιμή. Ένα ακόμη μειονέκτημα είναι ότι απαιτεί τον υπολογισμό του Ιακωβιανού πίνακα σε κάθε επανάληψη καθώς και το ότι επιλύει το γραμμικό σύστημα σε κάθε επανάληψη. Έτσι η μέθοδος γίνεται ιδιαίτερα δαπανηρή σε υπολογιστικό κόστος το οποίο ανέρχεται στην τάξη $O(n^3)$ όπου n η διάσταση του συστήματος.

Αλγόριθμος της μεθόδου του Νεύτωνα (Newton Method)

Ο αλγόριθμος της μεθόδου του Νεύτωνα είναι ο ακόλουθος:

1. Είσοδος: u_0 , tol , u , ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων n , F
2. Έξοδος: n , $u^{(i+1)}$
3. Για $i = 0, 1, 2, \dots, n$ επανέλαβε
 - (α') Υπολογισμός των $F(u^{(i)})$ και $J(u^{(i)})$
 - (β') Επίλυση του γραμμικού συστήματος $J(u^{(i)})y^{(i)} = -F(u^{(i)})$
 - (γ') $u^{(i+1)} = u^{(i)} + y^{(i)}$

(δ') Αν $\|u^{(i+1)} - u^{(i)}\|_2 < tol\ u$ τότε
δώσε $n, u^{(i+1)}$

(ε') Τέλος αν

4. Τέλος για

Μια σύντομη περιγραφή της μεθόδου του Νεύτωνα είναι:

Έστω u_0 η αρχική προσέγγιση. Τότε προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα :
 $J(u_0)y = -F(u_0)$

Εφαρμόζουμε μια από τις επαναληπτικές μεθόδους, μέθοδο απότομης καθόδου, μέθοδο συζυγών κλίσεων, γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων, οπότε προκύπτει μια καινούργια προσέγγιση $u_1 = u_0 + y$. Αν ικανοποιείται το κριτήριο τερματισμού το οποίο έχουμε επιλέξει ($\|u_1 - u_0\|_2 < \varepsilon$) τότε έχουμε βρεί την λύση, διαφορετικά θέτουμε στην $u_0 \leftarrow u_1$ οπότε προκύπτει ένα καινούργιο σύστημα $J(u_1)y = -F(u_1)$ και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μεχρι να επιτευχθεί σύγκλιση της μεθόδου.

3.6.3 Σύγκλιση της μεθόδου του Νεύτωνα

Η μέθοδος του Νεύτωνα συγκλίνει τετραγωνικά όταν δοθεί καλή αρχική προσέγγιση, δηλαδή αρχική προσέγγιση κοντά στη λύση. Η τετραγωνική σύγκλιση είναι ένα από τα πλεονεκτήματα της μεθόδου του Νεύτωνα. Αυτό σημαίνει ότι το σφάλμα σε μια επανάληψη είναι της τάξης του τετραγώνου του σφάλματος της προηγούμενης επανάληψης. Στη συνέχεια παραθέτουμε το θεώρημα σύγκλισης της μεθόδου [10].

Θεώρημα: Έστω $F = (f_1, f_2, \dots, f_n) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση σε μια ανοιχτή περιοχή $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ η οποία περιέχει την ακριβή λύση u . Υποθέτουμε ότι υπάρχουν η $J^{-1}(u)$, θετικές σταθερές R, C, L τέτοιες ώστε $\|J^{-1}(u)\|_2 \leq C$ και ότι για την J ισχύει η συνθήκη του Lipschitz. Δηλαδή

$$\exists L \geq 0, \forall u_1, u_2 \in B(u, R) \quad \|J(u_1) - J(u_2)\|_2 \leq L \|u_1 - u_2\|_2. \quad (3.6)$$

όπου $B(u, R)$ μια ανοιχτή σφαίρα στον \mathbb{R}^n με κέντρο u και ακτίνα R που περιέχει τη λύση x . Τότε $R > 0$ τέτοιο ώστε, $\forall u_0 \in B(u, R)$, η ακολουθία που προκύπτει από τις σχέσεις (3.3) και (3.5) είναι καλά ορισμένη και συγκλίνει στο u με, $\|u^{(k+1)} - u\|_2 \leq CL \|u^{(k)} - u\|_2^2$

Περισσότερες λεπτομέρειες για τη μέθοδο του Νεύτωνα μπορούν να βρεθούν στα συγγράματα των A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, Numerical Mathematics [10] και Γ. Ακρίβης, Β. Δουγαλής, Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση [15].

Ένα από τα μειονεκτήματα της μεθόδου του Νεύτωνα όπως προαναφέραμε είναι ότι απαιτεί υπολογισμό των μερικών παραγώγων του Ιακωβιανού πίνακα σε κάθε επανάληψη, κάτι το οποίο μπορεί να είναι ιδιαίτερα δαπανηρό. Το γεγονός αυτό αποτέλεσε το κίνητρο για την τροποποίηση της μεθόδου του Νεύτωνα. Υπάρχουν αρκετές τροποποιημένες μέθοδοι του Νεύτωνα. Μερικές από τις πιο γνωστές είναι η Quasi-Newton, Fixed-Newton και Interval-Newton οι οποίες στηρίζονται στη μέθοδο του Νεύτωνα.

Κλείνοντας, σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάστηκαν οι επαναληπτικές μέθοδοι απότομης καθόδου, συζυγών κλίσεων και γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων για την επίλυση γραμμικών συστημάτων. Επίσης, για την επίλυση μη γραμμικών συστημάτων παρουσιάστηκε ένας συνδυασμός αυτών με τη μέθοδο του Νεύτωνα. Στο επόμενο κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε τα σημαντικότερα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή των παραπάνω μεθόδων.

ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Γνωρίζουμε ότι τα περισσότερα φυσικά προβλήματα βασίζονται στις διαφορικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές περιγράφουν κατά μοναδικό τρόπο τα φαινόμενα που μοντελοποιούν εάν συμπληρωθούν με κατάλληλες βοηθητικές συνθήκες, δηλαδή αρχικές και συνοριακές. Στην παρούσα εργασία ασχοληθήκαμε με προβλήματα συνοριακών τιμών και πιο συγκεκριμένα με την επίλυση προβλημάτων ελλειπτικού τύπου. Ασχοληθήκαμε με ΜΔΕ ελλειπτικού τύπου οι οποίες περιγράφουν φαινόμενα ισοροπίας και συγκεκριμένα με τις εξισώσεις Laplace και Poisson που έχουν εφαρμογή σε ευρύ φάσμα φυσικών προβλημάτων όπως η διάδοση της θερμότητας, η ροή των ρευστών, η διάδοση κυμάτων και άλλα προβλήματα.

Η επίλυση των ΜΔΕ εκτός από τις αναλυτικές μεθόδους έγινε χρησιμοποιώντας τις αριθμητικές μεθόδους πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων όγκων. Με εφαρμογή αυτών των μεθόδων καταλήξαμε σ' ένα σύστημα της μορφής $Ax = b$. Το κοινό χαρακτηριστικό όλων των μεθόδων διακριτοποίησης είναι ότι οδηγούν σ' ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Το σύστημα συνήθως είναι μεγάλης κλίμακας δηλαδή αποτελείται από χιλιάδες ή και εκατομύρια αλγεβρικές εξισώσεις. Η λύση ενός τέτοιου συστήματος απαιτεί ένα πολύ μεγάλο αριθμό υπολογισμών. Ακόμη και με τη χρήση γρήγορου υπολογιστή, η λύση μπορεί να είναι χρονοβόρα και να απαιτεί μεγάλη υπολογιστική μνήμη.

Εφαρμόσαμε τις μεθόδους διακριτοποίησης σε συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα $n \times n$ καθώς επίσης και σε μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα $n \times m$. Τα βασικά χαρακτηριστικά του συστήματος $Ax = b$, είναι ότι ο πίνακας A των συντελεστών του είναι συμμετρικός, θετικά ορισμένος και block διαγώνιος. Για πολύ μεγάλα γραμμικά συστήματα οι επαναληπτικές μέθοδοι είναι πολύ πιο γρήγορες από τις άμεσες. Έτσι εφαρμόσαμε τις επαναληπτικές μεθόδους απότομης καθόδου, συζυγών κλίσεων και την γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων, αξιοποιώντας έτσι τα βασικά χαρακτηριστικά του πίνακα A . Εφαρμόζοντας αυτές τις μεθόδους επιτυγχάνουμε μείωση του υπολογιστικού κόστους και μειωμένη απαίτηση σε μνήμη σε σχέση με τις άμεσες αριθμητικές μεθόδους. Ο πίνακας του

44.4.1. Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων

συστήματος είναι αραιός. Η εκμετάλλευση αυτού του χαρακτηριστικού του πίνακα, είναι το μεγαλύτερο πλεονέκτημα των επαναληπτικών μεθόδων και γι' αυτό προτιμώνται όταν η τάξη του πίνακα είναι πολύ μεγάλη. Η συμπεριφορά των επαναληπτικών μεθόδων εξαρτάται από τις συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούμε σε κάθε πλευρά του χωρίου στο οποίο μελετάται το πρόβλημα.

Τέλος επιλύσαμε το μη γραμμικό πρόβλημα

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = ku^2 \quad (4.1)$$

εφαρμόζοντας έναν αλγόριθμο που συνδυάζει τη μέθοδο Νεύτωνα με τις επαναληπτικές μεθόδους για γραμμικά συστήματα. Ο αλγόριθμος εφαρμόστηκε τόσο για την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών όσο και για τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων.

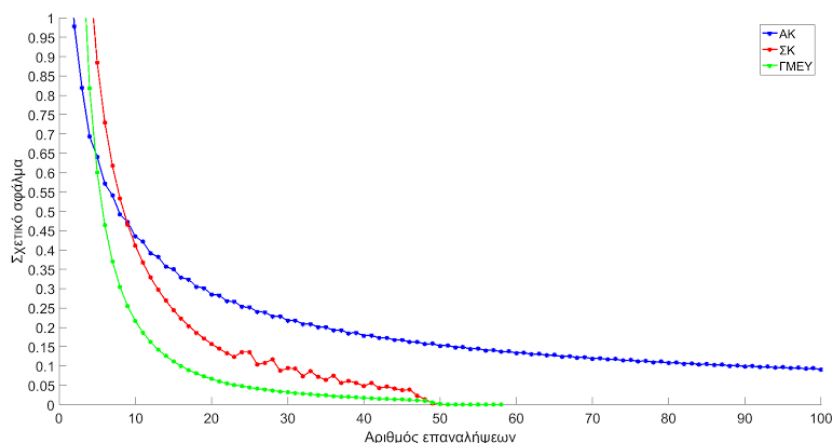
4.1 Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων

4.1.1 Εφαρμογή σε συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα

Ξεκινώντας από τα συμμετρικά γραμμικά υπολογιστικά πλέγματα συγκρίνουμε την αναλυτική και την αριθμητική λύση για τις εξισώσεις Laplace και Poisson που προέκυψαν για ένα υπολογιστικό πλέγμα 100×100 στοιχείων τόσο με εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών όσο και με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Οι εκφράσεις και των δυο μεθόδων είναι παρόμοιες με την προϋπόθεση ότι έχουμε ίδιες διαμερίσεις. Οι συνοριακές συνθήκες τύπου Dirichlet αντιμετωπίζονται με τον ίδιο τρόπο και στις δυο μεθόδους. Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών δίνει προσεγγίσεις 2ης τάξης αλλά εφαρμόζεται μόνο σε δομημένα πλέγματα, σε αντίθεση με την μέθοδο πεπερασμένων όγκων που μπορεί να εφαρμοστεί και σε μη δομημένα πλέγματα. Είναι και οι δυο δεύτερης τάξης ακρίβειας αφού το σφάλμα αποκοπής είναι της τάξης $O(\Delta x^2) + O(\Delta y^2)$. Οι μέθοδοι αφορούν τοπική βάση δηλαδή υπάρχει μόνο εξάρτηση μεταξύ των γειτονικών κόμβων. Στη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών η τάξη ακρίβειας εξαρτάται από το σφάλμα αποκοπής κατά την ανάπτυξη σε σειρά Taylor και στη μέθοδο πεπερασμένων όγκων από το προφίλ (γραμμικό ή σταθερό προφίλ) που θεωρήσαμε στους πεπερασμένους όγκους. Ο περιορισμός σε απλές γεωμετρίες είναι ένα σημαντικό μειονέκτημα και για τις δυο μεθόδους. Η ΜΠΔ μειονεκτεί σε σχέση με τη ΜΠΟ αφού τα αριθμητικά σχήματα των μεγαλύτερων τάξεων από τη δεύτερη είναι πιο δύσκολο να αναπτυχθούν σε τριδιάστατη μορφή. Βασικό πλεονέκτημα της ΜΠΔ είναι ότι μπορεί να

εφαρμοστεί σε γραμμικά ή μη γραμμικά προβλήματα και με μικρή υπολογιστική προσπάθεια να παρέχει αξιόπιστες προσεγγίσεις της λύσης του προβλήματος. Η ΜΠΔ είναι μια διαφορική μέθοδος, γίνεται δηλαδή αριθμητική διαφορίση. Οι λύσεις υπολογίζονται μόνο στα κομβικά σημεία του πεδίου τιμών και ανάμεσα σε αυτά δεν γνωρίζουμε τις τιμές της άγνωστης συνάρτησης. Η ΜΠΟ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για κάθε τύπο πλέγματος με κατάλληλες τροποποιήσεις. Έτσι είναι κατάλληλη για πολύπλοκες γεωμετρίες. Η ΜΠΟ εφαρμόζεται σε ολοκληρωτική μορφή που ισχύει σε κάθε όγκο ελέγχου, ανεξάρτητα από το σχήμα του. Το βασικό πλεονέκτημα της ΜΠΟ είναι ότι η ποσότητα διατηρείται σταθερή σε κάθε όγκο ελέγχου (divergent free method). Τα αριθμητικά σχήματα που προκύπτουν είναι συντηρητικά, δηλαδή μέσα στον όγκο ελέγχου ικανοποιείται η διατήρηση της άγνωστης ποσότητας.

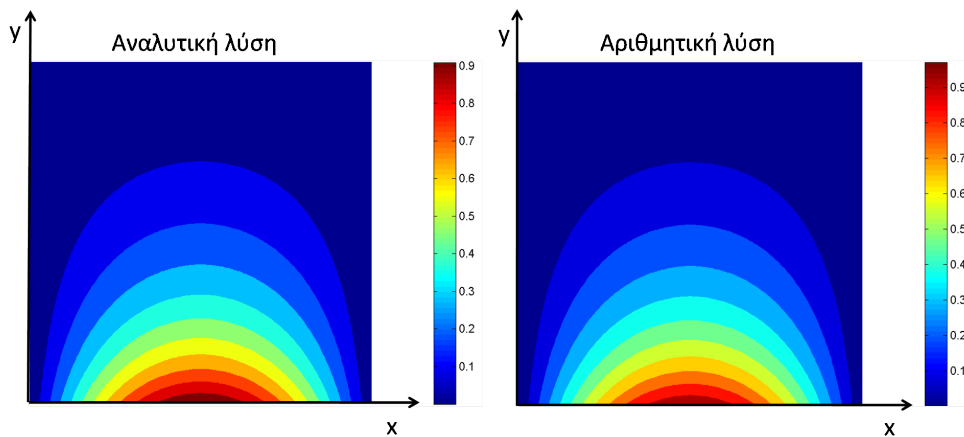
Στη συνέχεια, για τις πρώτες 100 επαναλήψεις για την εξίσωση του Laplace με την μέθοδο των ΠΔ και για ένα υπολογιστικό πλέγμα 40×40 , παρουσιάζουμε το σχετικό σφάλμα ($\|r\|/\|b\|$, $r = b - A * x$) για τις τρεις επαναληπτικές μεθόδους που έχουμε εφαρμόσει. Παρατηρείται ότι η σύγκλιση και για τις 3 μεθόδους είναι παρόμοια, με πιο αργή σύγκλιση για την μέθοδο απότομης καθόδου και πιο γρήγορη για την γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων. Τόσο η μέθοδος συζυγών κλίσεων όσο και η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων συγκλίνουν στην λύση, σε 57 επαναλήψεις, γι' αυτό το πρόβλημα, ενώ η μέθοδος απότομης καθόδου δεν έχει φτάσει στην επιθυμητή ακρίβεια στις 1600 επαναλήψεις. Η γραφική παράσταση για το σχετικό σφάλμα δίνεται στο σχήμα 4.1.



Σχήμα 4.1: Σύγκλιση των επαναληπτικών μεθόδων για την εξίσωση Laplace με τη μέθοδο των ΠΔ για ένα υπολογιστικό πλέγμα 40×40 στοιχείων.

46 4.1. Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων

Η γραφική παράσταση της αναλυτικής και της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο Π.Δ. δίνεται στο σχήμα 4.2. Από το σχήμα 4.2 παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που δίνουν οι επαναληπτικές μέθοδοι σχεδόν ταυτίζονται με την αναλυτική λύση της Laplace. Το σφάλμα ανάμεσα στις δυο λύσεις όπως φαίνεται στον πίνακα 4.1 είναι μικρότερο της τάξης του 10^{-4} .

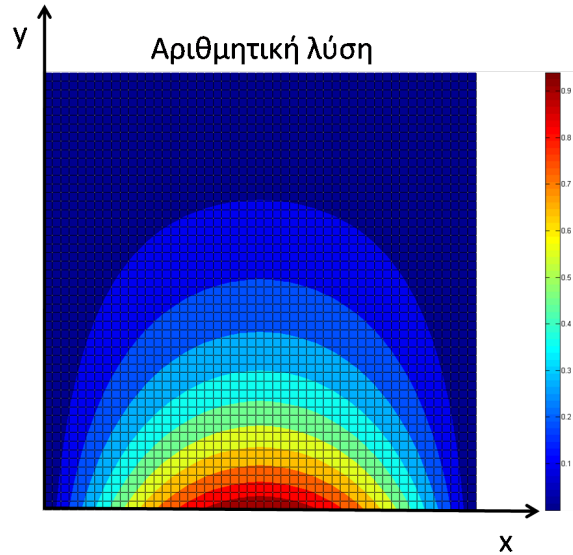


Σχήμα 4.2: Αναλυτική και αριθμητική λύση της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο των ΠΔ για ένα υπολογιστικό πλέγμα 100×100 στοιχείων.

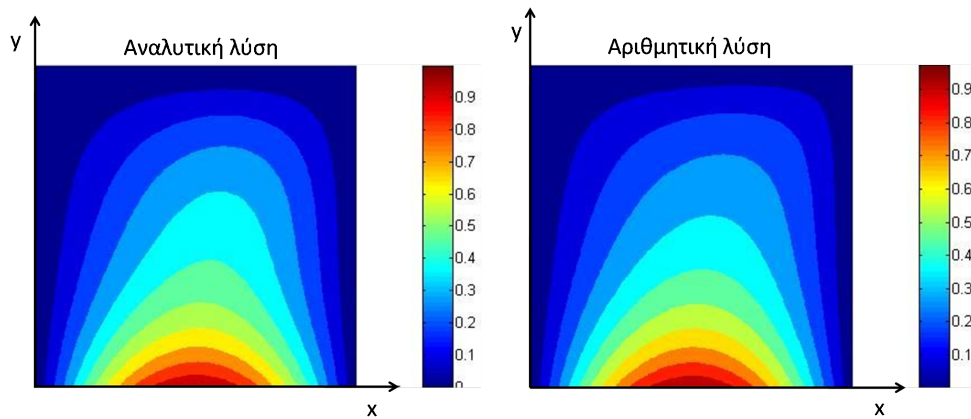
Παρόμοια είναι τα αποτελέσματα που προκύπτουν με διακριτοποίηση του προβλήματος με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Η γραφική παράσταση της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο Π.Ο. δίνεται στο σχήμα 4.3. Από το σχήμα 4.3 παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που δίνουν οι επαναληπτικές μέθοδοι είναι εξίσου ικανοποιητικά όπως και στην ΜΠΔ. Το σφάλμα ανάμεσα στις δυο λύσεις είναι μικρότερο της τάξης του 10^{-4} και σ' αυτή την περίπτωση όπως φαίνεται στον πίνακα 4.2.

Για την εξίσωση Poisson, από το σχήμα 4.4 παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που δίνουν οι επαναληπτικές μέθοδοι σχεδόν ταυτίζονται με την αναλυτική λύση της Poisson. Το σφάλμα ανάμεσα στις δυο λύσεις είναι μικρότερο της τάξης του 10^{-4} ανάλογα με την αριθμητική μέθοδο που χρησιμοποιούμε.

Το σφάλμα που παίρνουμε από την εφαρμογή μιας μεθόδου οφείλεται στο σφάλμα προσέγγισης ή σφάλμα αποκοπής και το σφάλμα στρογγύλευσης. Το σφάλμα αποκοπής ή προσέγγισης είναι η διαφορά μεταξύ της ΜΔΕ και της εξίσωσης διαφορών που προκύπτει με εφαρμογή της ΜΠΔ ή της ΜΠΟ, η οποία την προσεγγίζει. Το σφάλμα αποκοπής ή προσέγγισης προέρχεται από το γεγονός ότι το αρχικό πρόβλημα προσεγγίζεται από ένα αριθμητικό το οποίο και λύνουμε



Σχήμα 4.3: Αριθμητική λύση της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο των Π.Ο. για ένα υπολογιστικό πλέγμα 50×50 στοιχείων.



Σχήμα 4.4: Αναλυτική και αριθμητική λύση της εξίσωσης Poisson με τη μέθοδο των ΠΔ για ένα υπολογιστικό πλέγμα 100×100 στοιχείων.

με κάποια αριθμητική μέθοδο. Το σφάλμα στρογγύλευσης προκύπτει λόγω του περιορισμένου αριθμού ψηφίων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, και υπάρχει πάντα. Οφείλεται στο γεγονός ότι οι αριθμοί απομνημονεύονται στον υπολογιστή

48 4.1. Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων

στρογγυλεμένοι σε πεπερασμένο αριθμό ψηφίων. Αυτό γίνεται για τα αρχικά δεδομένα του προβλήματος αλλά και για όλους τους αριθμούς που προέρχονται από κάθε ενδιάμεση πράξη. Όσο αυξάνεται ο αριθμός των διακριτών σημείων του πλέγματος το σφάλμα προσέγγισης τείνει να εξαλειφθεί. Όμως αυξάνεται το σφάλμα στρογγύλευσης καθώς και ο υπολογιστικός χρόνος. Συνεπώς με εκλεπτυνση του βήματος παίρνω μικρότερο προσεγγιστικό σφάλμα. Επειδή όμως οι πράξεις γίνονται με υπολογισμούς πεπερασμένης ακρίβειας το σφάλμα στρογγύλευσης μπορεί να συσσωρευθεί και να αλλοιώσει το τελικό αποτέλεσμα [16].

Η σύγκλιση της προσεγγιστικής λύσης στην ακριβή λύση προϋποθέτει την ευστάθεια και την ακρίβεια της μεθόδου. Ευσταθής είναι η μέθοδος όταν το σφάλμα τείνει στο μηδέν κατά την πρόοδο των υπολογισμών. Ακριβής είναι η μέθοδος όσο πιο μεγάλη είναι η διαμέριση. Γενικά όσο πιο μεγάλη είναι η διαμέριση δηλαδή όσο πιο μικρό είναι το βήμα τόσο πιο ακριβής είναι η λύση. Όμως έτσι αυξάνεται ο υπολογιστικός χρόνος και το σφάλμα στρογγύλευσης. Η ακρίβεια οφείλεται στην μέθοδο διακριτοποίησης και εδώ η αριθμητική τεχνική είναι 2ης τάξης ακρίβειας όπως προαναφέραμε. Για τα προβλήματα που μελετάμε και στα ίδια υπολογιστικά πλέγματα με ίδιο σφάλμα αποκοπής τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι παρόμοια.

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον πίνακα 4.1 με τα αποτελέσματα που προέκυψαν για διάφορα υπολογιστικά πλέγματα. Σε αυτόν βλέπουμε το μέγιστο σφάλμα αποκοπής (σ.α.), δηλαδή τη μέγιστη διαφορά μεταξύ της αναλυτικής και της αριθμητικής λύσης, $\sigma.α. = \|x - \bar{x}\|_{\infty}$, όπου x η αναλυτική λύση και \bar{x} η αριθμητική λύση. Το σφάλμα αυτό εμπεριέχει και το σφάλμα προσέγγισης και το σφάλμα αποκοπής. Το σφάλμα προσέγγισης επηρεάζει το αποτέλεσμα κατά το μεγαλύτερο ποσοστό. Επίσης παρουσιάζεται ο αριθμός των επαναλήψεων σε κάθε εφαρμογή των μεθόδων απότομης καθόδου, συζυγών κλίσεων και της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων. Ο αριθμός επαναλήψεων στον αριθμητικό μας κώδικα έχουμε επιβάλλει να είναι το πολύ $n \times m$ επαναλήψεις. Οπότε και αυτό αποτελεί ένα κριτήριο τερματισμού της διαδικασίας.

Στον πίνακα 4.1 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την εξίσωση Laplace και για την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Η επαναληπτική διαδικασία ολοκληρώνεται όταν ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης $\|x^{(n+1)} - x^{(n)}\|_2 < \varepsilon$, όπου $\varepsilon = 10^{-20}$.

Αντίστοιχα στον πίνακα 4.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Παρατηρούμε ότι όλες οι μέθοδοι συγκλίνουν για τα διάφορα υπολογιστικά πλέγματα που εξετάσαμε. Οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων και γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων, στην περίπτωση που ο πίνακας A του συστήματος είναι συμμετρικός, είναι ισοδύναμες. Κάνουν τον ίδιο αριθμό

επαναλήψεων και παρουσιάζουν το ίδιο υπολογιστικό κόστος.

| | Απότομης καθόδου <i>SD</i> | Συζυγών κλίσεων <i>CGM</i> | Γεν. μεθ. ελαχ. υπολοίπων <i>GMRES</i> |
|-----------|---|---|---|
| 50 × 50 | $\epsilon = 8.3079 \times 10^{-4}$ $n = 2500$ | $\epsilon = 1.0957 \times 10^{-4}$ $n = 79$ | $\epsilon = 1.0957 \times 10^{-4}$ $n = 79$ |
| 100 × 100 | $\epsilon = 7.054 \times 10^{-4}$ $n = 10000$ | $\epsilon = 2.7958 \times 10^{-5}$ $n = 157$ | $\epsilon = 2.7958 \times 10^{-5}$ $n = 157$ |
| 200 × 200 | $\epsilon = 6.5866 \times 10^{-4}$ $n = 40000$ | $\epsilon = 7.0603 \times 10^{-6}$ $n = 305$ | $\epsilon = 7.0603 \times 10^{-6}$ $n = 305$ |
| 250 × 250 | $\epsilon = 6.52 \times 10^{-4}$ $n = 62500$ | $\epsilon = 4.5277 \times 10^{-6}$ $n = 378$ | $\epsilon = 4.5277 \times 10^{-6}$ $n = 378$ |

Πίνακας 4.1: Αριθμητικά αποτελέσματα για τα συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα και για τις τρεις επαναληπτικές μεθόδους με την μέθοδο των Π.Δ.

| | Απότομης καθόδου <i>SD</i> | Συζυγών κλίσεων <i>CGM</i> | Γεν. μεθ. ελαχ. υπολοίπων <i>GMRES</i> |
|-----------|---|---|---|
| 50 × 50 | $\epsilon = 8.3079 \times 10^{-4}$ $n = 2500$ | $\epsilon = 1.0957 \times 10^{-4}$ $n = 79$ | $\epsilon = 1.0957 \times 10^{-4}$ $n = 79$ |
| 100 × 100 | $\epsilon = 7.054 \times 10^{-4}$ $n = 10000$ | $\epsilon = 2.7958 \times 10^{-5}$ $n = 157$ | $\epsilon = 2.7958 \times 10^{-5}$ $n = 157$ |
| 200 × 200 | $\epsilon = 6.5866 \times 10^{-4}$ $n = 40000$ | $\epsilon = 7.0603 \times 10^{-6}$ $n = 305$ | $\epsilon = 7.0603 \times 10^{-6}$ $n = 305$ |
| 250 × 250 | $\epsilon = 6.52 \times 10^{-4}$ $n = 62500$ | $\epsilon = 4.5277 \times 10^{-6}$ $n = 378$ | $\epsilon = 4.5277 \times 10^{-6}$ $n = 378$ |

Πίνακας 4.2: Αριθμητικά αποτελέσματα για τα συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα και για τις τρεις επαναληπτικές μεθόδους με την μέθοδο των Π.Ο.

Παρατήρηση: Η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων έχει εφαρμογή σε προβλήματα στα οποία ο πίνακας A του συστήματος προς επίλυση, είναι μη συμμετρικός, σε αντίθεση με τη μέθοδο συζυγών κλίσεων που συγκλίνει μόνο σε πρόβλημα που ο πίνακας A του συστήματος είναι συμμετρικός. Ένα πρόβλημα που θα μας οδηγούσε σε μη συμμετρικό πίνακα είναι το:

$$-\nabla^2 u = kuu_x,$$

το οποίο μπορεί να επιλυθεί μόνο με εφαρμογή της γενικευμένης μεθόδου ελαχίστων υπολοίπων.

50 4.1. Σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων γραμμικών συστημάτων

Η μέθοδος της απότομης καθόδου έχει μεγαλύτερο σφάλμα σε σύγκριση με τις άλλες δυο μεθόδους και ο αριθμός επαναλήψεων είναι ο μέγιστος που μπορεί να επιτευχθεί, δηλαδή το πολύ $n \times m$ επαναλήψεις. Αυτό παρατηρείται τόσο σε μικρά όσο και σε μεγαλύτερα πλέγματα. Η μέθοδος της απότομης καθόδου συγκλίνει γρήγορα για προβλήματα με καλή κατάσταση στα οποία ο δείκτης κατάστασης του πίνακα A είναι μικρός. Στα αποτελέσματα των παραπάνω πινάκων η μέθοδος απότομης καθόδου δεν συγκλίνει, αλλά σταματάει μετά από $n \times m$ επαναλήψεις το οποίο έχουμε θέσει ως κριτήριο τερματισμού.

Αντίστοιχα οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων και γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων παρουσιάζουν το ίδιο σφάλμα. Αυτό παρατηρείται τόσο στην ΜΠΔ όσο και στην ΜΠΟ. Όσον αφορά το χρόνο που απαιτείται για την επίλυση του συστήματος, η ΜΠΔ είναι ελάχιστα γρηγορότερη από την ΜΠΟ λόγω της μικρότερης υπολογιστικής πολυπλοκότητάς της ΜΠΔ.

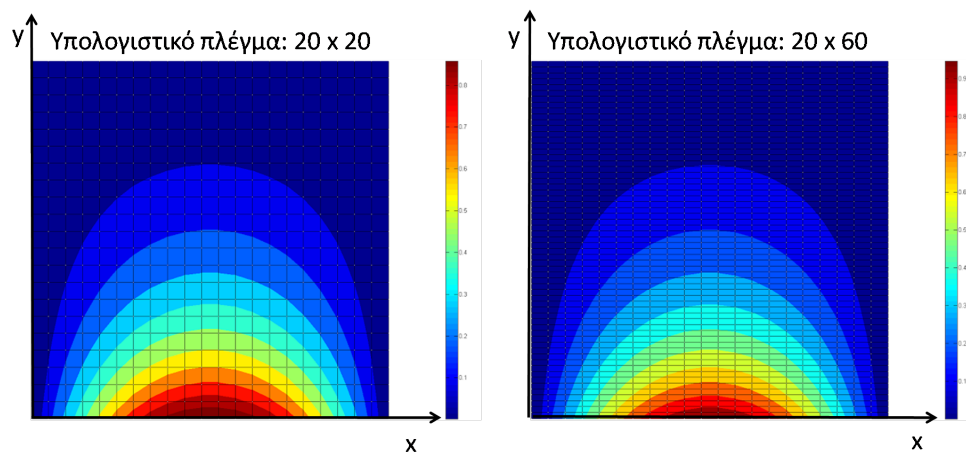
Η μέθοδος συζυγών κλίσεων είναι αποτελεσματική για την επίλυση μεγάλης κλίμακας, αραιών, συμμετρικών, θετικά ορισμένων συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Είναι “ανθεκτική” μέθοδος η οποία αν συνδυαστεί με κατάλληλο προρρυθμιστή μπορεί να επιτύχει γρήγορη σύγκλιση σε μια ακριβή λύση. Η παρουσία του προρρυθμιστή (αφού ο ρυθμός σύγκλισης εξαρτάται από το φάσμα των ιδιοτιμών του πίνακα A) παίζει σημαντικό ρόλο στο γραμμικό σύστημα και η επιλογή του οδηγεί στο επιθυμητό αποτέλεσμα χωρίς περαιτέρω επιβάρυνση όσον αφορά τις πράξεις και το χρόνο. Από τα αποτελέσματά μας είδαμε ότι με χρήση του προρρυθμιστή που προκύπτει από την Incomplete Cholesky, η μέθοδος υπερτερεί τόσο ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων όσο και ως προς το χρόνο. Δηλαδή, μια προρρυθμισμένη μέθοδος θα κάνει λιγότερες επαναλήψεις και θα συγκλίνει πιο γρήγορα.

Σε γενικές γραμμές η μέθοδος συζυγών κλίσεων είναι πιο αποτελεσματική και αποδοτική, με ταχύτερη σύγκλιση και πολυπλοκότητες χώρου και χρόνου μικρότερες σε σχέση με την μέθοδο απότομης καθόδου. Η μέθοδος απότομης καθόδου έχει σχετικά αργή σύγκλιση. Απαιτούνται τόσα βήματα όσο είναι το μέγεθος του συστήματος, το οποίο έχουμε ορίσει ως κριτήριο τερματισμού. Για την γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων όταν ο πίνακας του συστήματος είναι συμμετρικός, είναι ισοδύναμη με την μέθοδο συζυγών κλίσεων, ενώ όταν ο πίνακας είναι μη συμμετρικός είναι η μοναδική από τις τρεις μεθόδους που εξετάστηκαν η οποία συγκλίνει στη λύση.

4.1.2 Εφαρμογή σε μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα

Εκτελώντας τη ίδια διαδικασία σε μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα, $n \times m$, παρατηρούμε ότι οι μέθοδοι δουλεύουν εξίσου καλά και δίνουν αξιόπιστα αποτελέσματα. Να τονίσουμε ότι ο πίνακας A , του συστήματος είναι και πάλι συμμετρικός, θετικά ορισμένος και block διαγώνιος.

Οι γραφικές παραστάσεις για την εξίσωση Laplace και για υπολογιστικά πλέγματα 20×20 και 20×60 δίνονται στο σχήμα 4.5. Παρατηρώντας τα υπολογιστικά πλέγματα 20×20 και 20×60 του σχήματος 4.5 βλέπουμε ότι όσο εκλεπτύνουμε το υπολογιστικό πλέγμα έστω και στη μια διάσταση, το πυκνότερο (20×60) υπολογιστικό πλέγμα δίνει διαφορετικά αποτελέσματα από το 20×20 τα οποία είναι πιο κοντά στην αναλυτική λύση.



Σχήμα 4.5: Αριθμητικά αποτελέσματα και αναπαράσταση για την εξίσωση Laplace σε υπολογιστικά πλέγματα 20×20 και 20×60 , αντίστοιχα.

Στη συνέχεια παραθέτουμε τον πίνακα 4.3 με τα αποτελέσματα που προέκυψαν για την εξίσωση Laplace, με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών και για διάφορα μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα.

Συγκεκριμένα, στον πίνακα 4.3 παρατηρούμε ότι η μέθοδος της απότομης καθόδου παρουσιάζει το μεγαλύτερο σφάλμα σε σχέση με τις άλλες δύο. Η μέθοδος δεν συγκλίνει και ο αριθμός των επαναλήψεων είναι ο μέγιστος που μπορεί να επιτευχθεί, δηλαδή $n \times m$ επαναλήψεις. Στα μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα, η μέθοδος των συζυγών κλίσεων και η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων είναι ισοδύναμες, όπως ακριβώς παρατηρήθηκε και στα συμμετρικά πλέγματα.

| | Απότομης καθόδου <i>SD</i> | Συζυγών κλίσεων <i>CGM</i> | Γεν. μεθ. ελαχ. υπολοίπων <i>GMRES</i> |
|-----------|---|--|--|
| 50 × 100 | $\epsilon = 6.6 \times 10^{-3}$ $n = 5000$ | $\epsilon = 6.878 \times 10^{-5}$ $n = 121$ | $\epsilon = 6.878 \times 10^{-5}$ $n = 121$ |
| 100 × 150 | $\epsilon = 3.5 \times 10^{-3}$ $n = 15000$ | $\epsilon = 2.023 \times 10^{-5}$ $n = 194$ | $\epsilon = 2.023 \times 10^{-5}$ $n = 194$ |
| 150 × 200 | $\epsilon = 2.9 \times 10^{-3}$ $n = 30000$ | $\epsilon = 9.785 \times 10^{-6}$ $n = 268$ | $\epsilon = 9.785 \times 10^{-6}$ $n = 268$ |
| 200 × 250 | $\epsilon = 1.44 \times 10^{-3}$ $n = 50000$ | $\epsilon = 5.794 \times 10^{-6}$ $n = 341$ | $\epsilon = 5.794 \times 10^{-6}$ $n = 341$ |

Πίνακας 4.3: Αριθμητικά αποτελέσματα για τα μη συμμετρικά υπολογιστικά πλέγματα και για τις τρεις επαναληπτικές μεθόδους.

Στην επόμενη ενότητα θα αναφερθούμε στο μη γραμμικό πρόβλημα, για την επίλυση του οποίου εφαρμόστηκαν οι τρεις επαναληπτικές μέθοδοι απότομης καθόδου, συζυγών κλίσεων, γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων σε συνδυασμό με τη μέθοδο του Νεύτωνα.

4.2 Το μη γραμμικό πρόβλημα

Οι επαναληπτικές μέθοδοι που αναφέραμε εφαρμόζονται σε γραμμικά αλγεβρικά συστήματα. Αν θέλουμε να λύσουμε ένα μη γραμμικό πρόβλημα θα πρέπει να συνδυάσουμε τις επαναληπτικές μεθόδους με μια μέθοδο για μη γραμμικά συστήματα όπως είναι η μέθοδος του Νεύτωνα.

Το μη γραμμικό πρόβλημα που επιλύσαμε είναι:

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = ku^2, \quad k \in [0, +\infty) \quad (4.2)$$

για τις διάφορες τιμές του k και με συνοριακές συνθήκες,

$$\begin{cases} u(x, 0) = \sin \frac{\pi x}{a}, & x \in [0, a], \\ u(x, b) = 0, & x \in [0, a], \\ u(0, y) = 0, & y \in [0, b], \\ u(a, y) = 0, & y \in [0, b]. \end{cases}$$

Μια σύντομη περιγραφή της διαδικασίας που ακολουθούμε είναι:

Έστω u_0 η αρχική προσέγγιση. Τότε προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα : $A(u_0)u = b$.

Εφαρμόζουμε μια από τις επαναληπτικές μεθόδους, απότομης καθόδου, συζυγών κλίσεων ή την γενικευμένη μέθοδο ελαχίστων υπολοίπων, οπότε προκύπτει μια καινούργια προσέγγιση, u_1 . Αν ικανοποιείται το κριτήριο τερματισμού το οποίο έχουμε επιλέξει, $\|u_1 - u_0\|_\infty < \epsilon$, με $\epsilon = 10^{-10}$, τότε έχουμε βρεί την λύση. Διαφορετικά θέτουμε στην $u_0 \leftarrow u_1$, οπότε προκύπτει ένα καινούργιο σύστημα, $A(u_1)u = b$ και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

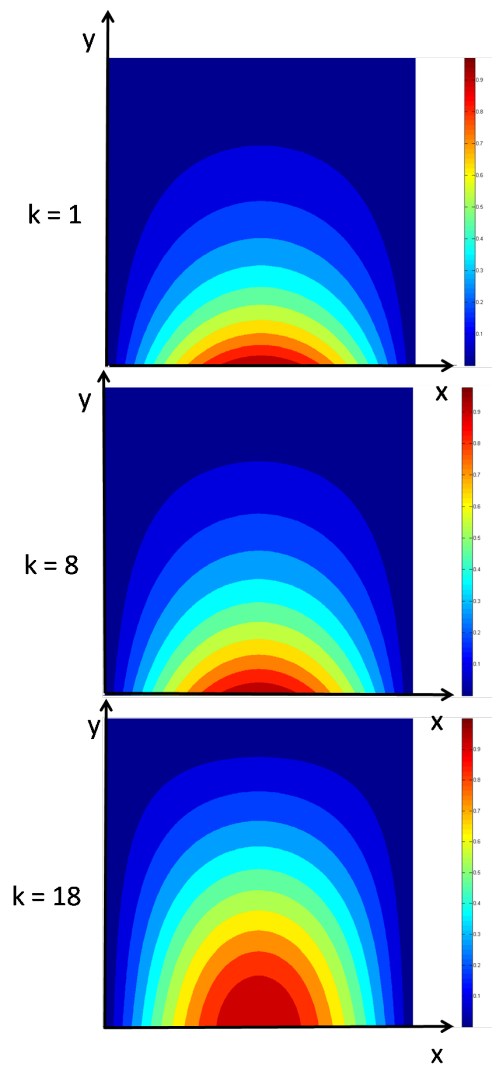
Οι γραφικές παραστάσεις για το μη γραμμικό πρόβλημα, για την εξίσωση Poisson και για διαφορετικές τιμές του k , δίνονται στο σχήμα 4.6. Από το σχήμα 4.6 παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η τιμή της παραμέτρου k τόσο πιο έντονη είναι η επίδραση του μη γραμμικού όρου, δηλαδή αυξάνεται η ποσότητα u . Για μεγάλες τιμές του k η μη γραμμικότητα αυξάνεται με αποτέλεσμα το πρόβλημα να επιλύεται δύσκολα με την αναπτυχθείσα μέθοδο, όπως χαρακτηριστικά φαίνεται στον πίνακα 4.4.

| | Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών <i>FD</i> | Μέθοδος πεπερασμένων όγκων <i>FV</i> |
|------------|--|---|
| $k_1 = 1$ | $n = 141, 243, 239, 254$ $m = 4$ $\epsilon = 8.04 \times 10^{-14}$ | $n = 202, 245, 243, 258$ $m = 4$ $\epsilon = 1.52 \times 10^{-14}$ |
| $k_2 = 10$ | $n = 141, 266, 244, 254$ $m = 5$ $\epsilon = 1.88 \times 10^{-11}$ | $n = 204, 266, 246, 240, 287$ $m = 5$ $\epsilon = 7.59 \times 10^{-13}$ |
| $k_3 = 18$ | $n = 141, 268, 248, 257, 257, 257, 260$ $m = 7$ $\epsilon = 1.45 \times 10^{-9}$ | $n = 141, 268, 248, 257, 257, 257, 260$ $m = 7$ $\epsilon = 7.28 \times 10^{-11}$ |

Πίνακας 4.4: Οι εσωτερικές n (CGM) και εξωτερικές επαναλήψεις m (Newton) για το μη γραμμικό πρόβλημα για τρεις τιμές του $k_i, i = 1, 2, 3$ και για υπολογιστικό πλέγμα 100×100 .

Στον πίνακα 4.4 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τις διάφορες τιμές του k , για ένα υπολογιστικό πλέγμα 100×100 για τις μεθόδους ΠΔ και ΠΟ. Σε αυτόν παρουσιάζουμε τον αριθμό των εσωτερικών επαναλήψεων, n , δηλαδή τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται για να συγκλίνει το γραμμικό υποπρόβλημα με μια από τις τρεις επαναληπτικές μεθόδους. Επίσης, βλέπουμε τον αριθμό των εξωτερικών επαναλήψεων, m , δηλαδή τον αριθμό των επαναλήψεων που χρειάζεται η μέθοδος του Νεύτωνα για να συγκλίνει στην λύση. Το σφάλμα τερματισμού της

μεθόδου του Νεύτωνα είναι μικρότερο της τάξης 10^{-10} , όπως φαίνεται στον πίνακα 4.4 δεδομένου ότι το σφάλμα που έχουμε επιβάλει για το γραμμικό υποπρόβλημα είναι της τάξης του 10^{-6} . Παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η τιμή της παραμέτρου k , αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων της μεθόδου του Νεύτωνα. Αυτό δείχνει ότι η μέθοδος δυσκολεύεται να βρεί την λύση για μεγάλες τιμές του k , όπως προαναφέραμε.



Σχήμα 4.6: Αριθμητικά αποτελέσματα για διάφορες τιμές του k σε υπολογιστικά πλέγματα 100×100 με την μέθοδο συζυγών κλίσεων CGM.

Ολοκληρώνοντας την ανάλυση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την εφαρμογή των επαναληπτικών μεθόδων για τα γραμμικά και μη γραμμικά συστήματα που επιλύσαμε θα κλείσουμε την εργασία με μια σύντομη συζήτηση της εφαρμογής των μεθόδων αυτών σε φυσικά, τεχνολογικά και μαθηματικά προβλήματα. Επίσης παραθέτουμε τα βασικά συμπεράσματα που προκύπτουν από την παραπάνω ανάλυση.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΣΥΖΗΤΗΣΗ - ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις συναντώνται συχνά ως μαθηματικά μοντέλα σε πολλούς τομείς της επιστήμης και της τεχνολογίας. Συνήθως όμως οι εξισώσεις αυτές δεν είναι εύκολο να επιλυθούν αναλυτικά, οπότε αποτελεί κοινή πρακτική η αναζήτηση προσεγγιστικών λύσεων με αριθμητικές μεθόδους. Στις μέρες μας κάτι τέτοιο μπορεί να επιτευχθεί με πολύ μικρό κόστος και μεγάλη ακρίβεια με την εφαρμογή επαναληπτικών μεθόδων.

Μετά την επιλογή του μαθηματικού μοντέλου, πρέπει να επιλεγεί η κατάλληλη μέθοδος διακριτοποίησης. Για να έχουμε μια προσεγγιστική αριθμητική λύση, πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια μέθοδος διακριτοποίησης, η οποία προσεγγίζει τις διαφορικές εξισώσεις με ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων, οι οποίες στη συνέχεια μπορούν να λυθούν αριθμητικά. Οι προσεγγίσεις αυτές εφαρμόζονται σε διακριτά σημεία στο χώρο ή και στον χρόνο. Η ακρίβεια των αριθμητικών αυτών αποτελεσμάτων, εξαρτάται από την ποιότητα και τη λεπτομέρεια της διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται. Υπάρχουν πολλές προσεγγιστικές μέθοδοι, αλλά οι πιο σημαντικές είναι οι ακόλουθες: Πεπερασμένων Διαφορών (FD), Πεπερασμένων Όγκων (FV) και Πεπερασμένων Στοιχείων (FE) [3]. Στην παρούσα εργασία ασχοληθήκαμε κυρίως με τις δύο πρώτες, τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Η μέθοδος ΠΟ βρίσκει εφαρμογή κυρίως σε προβλήματα ρευστομηχανικής [7].

Η διακριτοποίηση οδηγεί σε ένα αλγεβρικό σύστημα που αποτελείται από ένα μεγάλο αριθμό αλγεβρικών εξισώσεων. Η μέθοδος επίλυσης που θα ακολουθήσουμε εξαρτάται από το πρόβλημα. Για παραβολικού τύπου προβλήματα π.χ. εξίσωση διάδοσης της θερμότητας, οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται απαιτούν επιπλέον των συνοριακών συνθηκών και αρχικές συνθήκες και σε κάθε χρονικό βήμα επιλύουν ένα ελλειπτικό πρόβλημα παρόμοιο με αυτό που μελετάται στην παρούσα εργασία. Οπότε η συνολική θεώρηση αυτής της εργασίας σχετίζεται άμεσα με την μελέτη των φυσικών και τεχνολογικών προβλημάτων και την αριθμητική επίλυση αυτών. Μια σημαντική εφαρμογή αυτών των μεθόδων είναι στην μηχανική των

ρευστών και κυρίως σε ρευστομηχανικές εφαρμογές που σχετίζονται με αλληλεπίδραση ρευστού με ρευστό ή ελαστικού ορίου με το ρευστό [17]. Η επίλυση των εξισώσεων της ρευστοδυναμικής έχει γίνει τόσο σημαντική που πλέον απασχολεί ένα μεγάλο ποσοστό ερευνητών στον τομέα αυτό και το ποσοστό αυτό αυξάνεται συνεχώς.

Είναι σήμερα γνωστό ότι οι εξισώσεις κίνησης ενός ρευστού Navier-Stokes (NS) περιγράφουν επ' ακριβώς όλες τις καταστάσεις ροής από τις πιο απλές, όπως η στρωτή ροή μέσα σε κυλινδρικούς αγωγούς και οριακά στρώματα πάνω από επίπεδες επιφάνειες, μέχρι τις πλέον περίπλοκες, όπως π.χ. η τυρβώδης ροή μέσα σε στροβιλοκινητήρες, και η ροή γύρω από αεροσκάφη και διαστημικά οχήματα. Η αδυναμία αναλυτικής επίλυσης ακόμη δε και η κατανόηση της ποιοτικής συμπεριφοράς των περίπλοκων εξισώσεων NS οδήγησε στην χρήση απλοποιημένων μορφών εξισώσεων κίνησης, όπως είναι οι εξισώσεις Euler, οι εξισώσεις του οριακού στρώματος και οι εξισώσεις του δυναμικού πεδίου ροής [7]. Η αναλυτική επίλυση αυτών των απλοποιημένων εξισώσεων κίνησης στην γενική τους μορφή είναι αδύνατη στις περισσότερες περιπτώσεις που συναντώνται στην πράξη. Στην παρούσα εργασία επιλύσαμε τις ΜΔΕ Laplace και Poisson οι οποίες χρησιμοποιούνται ως εργαλεία σε πολλά φυσικά προβλήματα συμπεριλαμβανομένου και της μηχανικής των ρευστών. Οι μέθοδοι διακριτοποίησης που αναπτύχθηκαν έχουν σκοπό τον υπολογισμό της τιμής της άγνωστης συνάρτησης σε κάθε κόμβο. Από τις συνοριακές συνθήκες που ορίζονται σε κάθε πρόβλημα μπορούμε να υπολογίσουμε τις τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους υπολογιστικούς κόμβους.

Επίσης τόσο σε γραμμικά συστήματα όσο και σε μη γραμμικά συστήματα μπορούν να εφαρμοστούν οι μέθοδοι πολλαπλών πλεγμάτων (multiscale grids). Μια τυπική διαδικασία πολλαπλών πλεγμάτων κατασκευάζεται από μια επαναληπτική διαδικασία, όπου οι λύσεις λαμβάνονται από πιο αραιά πλέγματα και στη συνέχεια οι διορθώσεις μετασχηματίζονται διαδοχικά σε πυκνά πλέγματα. Όταν το επίπεδο επανάληψης φθάσει το πυκνότερο πλέγμα, οι λύσεις παρατείνονται διαδοχικά πίσω στα πιο αραιά πλέγματα και ούτω καθεξής, μέχρι να συγκλίνει η λύση [18]. Λειτουργούν με μια σειρά πλεγμάτων, έτσι ώστε η λύση ν' αναζητείται στο πιο πυκνό πλέγμα. Τα υπόλοιπα πλέγματα είναι πιο αραιά του ίδιου χωρίου λύσης, η οποία διατάσσεται από μια ακολουθία, στην οποία κάθε πλέγμα είναι περίπου το μισό σε αριθμό των σημείων των πλεγμάτων από το προηγούμενο πλέγμα ή είναι δύο φορές πιο αραιά.

Οι επαναληπτικές μέθοδοι που μελετήθηκαν σε αυτή την εργασία, όπως οι μέθοδος απότομης καθόδου, η μέθοδος συζυγών κλίσεων και η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων, έχουν βρει μεγάλη εφαρμογή στα παραπάνω επιστημονικά

προβλήματα και μπορούν με μεγάλη ακρίβεια και αρκετά καλή ταχύτητα να δώσουν αξιόπιστες λύσεις βασιζόμενες σε μη-γραμμικά προβλήματα όπου άλλες μέθοδοι είτε αδυνατούν είτε επιλύουν με πολύ αργό ρυθμό και μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Οι επαναληπτικές μέθοδοι, βρίσκουν εφαρμογή σε γραμμικά ή μη γραμμικά συστήματα που γραμμικοποιούνται χρησιμοποιώντας διαδικασίες όπως η μέθοδος του Νεύτωνα. Οι μέθοδοι αυτοί έχουν αναπτυχθεί για την επίλυση ελλειπτικού τύπου ΜΔΕ και μια πρώιμη εργασία που προτείνει τα παραπάνω είναι η εργασία των Consus, Golub, O'Leary [19]. Οι δημοσιεύσεις δίνουν ενδεικτικά κάποιες εφαρμογές των επαναληπτικών μεθόδων στην πράξη, [20, 21, 22, 23]. Σε αυτές τις εργασίες προτείνεται μια επαναληπτική διαδικασία, παρόμοια με αυτή που παρουσιάστηκε στην διπλωματική εργασία για το μη γραμμικό πρόβλημα. Η επαναληπτική διαδικασία εφαρμόζεται στην επίλυση μη γραμμικών συστημάτων ΜΔΕ της ρευστομηχανικής.

Συνοψίζοντας, σε αυτή την εργασία ασχοληθήκαμε με:

- Μεθόδους που έχουν μεγάλη εφαρμογή σε φυσικά και τεχνολογικά προβλήματα και απασχολούν έντονα την επιστημονική κοινότητα.
- Μεθόδους που παράγουν αξιόπιστα αποτελέσματα πιο γρήγορα από τις κλασικές μεθόδους.
- Προβλήματα που καταλήγουν σε μεγάλης κλίμακας συστήματα τα οποία για να επιλυθούν χρειάζονται μεγάλη υπολογιστική ισχύ και μνήμη.
- Την εφαρμογή των επαναληπτικών μεθόδων σε γραμμικά αλλά και σε μη γραμμικά συστήματα με την βοήθεια της μεθόδου του Νεύτωνα.
- Την σύγκριση αναλυτικών και αριθμητικών αποτελεσμάτων τα οποία έχουν πολύ καλή συμφωνία τόσο για την Laplace όσο και για την Poisson και τέλος,
- Με την υλοποίηση στο προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab με κώδικα ο οποίος παρατίθεται στο παράρτημα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Γ. Δ. Ακρίβης και Ν. Αλικιάκος, Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις, Σύγχρονη Εκδοτική, 2011.
- [2] Γ. Δ. Ακρίβης, Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις, Πανεπιστημιακές Παραδόσεις, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων και Πανεπιστήμιο Κύπρου, Ιωάννινα, 2008.
- [3] Γ. Ακρίβης, Β. Δουγαλής, Αριθμητικές μέθοδοι για ΣΔΕ, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2η Έκδοση, 2013.
- [4] Χ. Μπαμπατζιμόπουλος, Εφαρμοσμένη Αριθμητική επίλυση ΜΔΕ, Ελληνικά Ακαδημαϊκά ηλεκτρονικά συγγράμματα και βοηθήματα, 2016.
- [5] S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, CRC Press, 1980.
- [6] Ε. Ν. Πετροπούλου, Διαφορικές εξισώσεις και εφαρμογές αυτών. Με στοιχειά θεωρίας πινάκων, ειδικών συναρτήσεων και ολοκληρωτικών μετασχηματισμών, Εκδόσεις GOTSIS, 2017.
- [7] C. A. J. Fletcher, Computational Techniques for Fluid Dynamics, Vol. 1, 2nd Edition, Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- [8] Δ. Βαλουγεώργης, Σημειώσεις στο μάθημα Αριθμητικές μέθοδοι, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2012.
- [9] Β. Δουγαλής, Δ. Νούτσος, Α. Χατζηδήμος, Αριθμητική γραμμική άλγεβρα, Ιωάννινα 2013.
- [10] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Salieri, Numerical Mathematics, 2nd edition, Springer-Verlag, Inc., Berlin, 2007.

- [11] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, 2nd edition, SIAM, 2000.
- [12] Y. Saad, Krylov Subspace Methods for Solving Large Unsymmetric Linear Systems. In: Math. Comp. 37.155, 1981.
- [13] Α. Γ. Μπουντουβής και Α. Ν. Σπυρόπουλος, Επαναληπτικές μέθοδοι προβολής σε υπόχωρους Krylov, Αθήνα, Εκδόσεις Ε.Μ.Π., 2012.
- [14] S. L. Campbell, I. C. F. Ipsen, C. T. Kelley and C. D. Meyer, GMRES and the Minimal Polynomial, BIT Numerical Mathematics, 36(4): 664-675, 1996.
- [15] Γ. Ακρίβης, Β. Δουγαλής, Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης. Ηράκλειο, 4η έκδοση, 2017.
- [16] Δ. Νούτσος, Αριθμητική ανάλυση και εφαρμογές, Πανεπιστημιακές Παραδόσεις, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα, 2001.
- [17] R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F.M. Najjar, A. Vargas, A. von Loebbecke, A versatile sharp interface immersed boundary method for incompressible flows with complex boundaries, Journal of Computational Physics, 227: 4825-4852, 2008.
- [18] T. Ye, R. Mittal, H. S. Udaykumar, and W. Shyy An Accurate Cartesian Grid Method for Viscous Incompressible Flows with Complex Immersed Boundaries, Journal of Computational Physics, 156: 209-240, 1999.
- [19] P. Concus, G. H. Golub, D. P. O' Leary, A generalized conjugate gradient method for the numerical solution of elliptic partial differential equations, MAA Studies in Mathematics, Vol. 24, Math. Assn. of America, 1984.
- [20] L. Ge, F. Sotiropoulos, A numerical method for solving the 3D unsteady incompressible Navier-Stokes equations in curvilinear domains with complex immersed boundaries, Journal of Computational Physics, 225: 1782-1809, 2007.
- [21] H. S. Udaykumar, R. Mittal, P. Rampunggoon, and A. Khanna, A Sharp Interface Cartesian Grid Method for Simulating Flows with Complex Moving Boundaries, Journal of Computational Physics, 174: 345-380, 2001.

- [22] M. Garbey, W. Shyy, A least square extrapolation method for improving solution accuracy of PDE computations, *Journal of Computational Physics*, 186: 1-23, 2003.
- [23] M. S. Celebi, Computation of transient nonlinear ship waves using an adaptive algorithm, *Journal of Fluids and Structures*, 14: 281-301, 2000.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Σε αυτό το παράρτημα παραθέτουμε τους κώδικες που αναπτύξαμε στο προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab. Αρχικά παρουσιάζονται οι κώδικες για το $n \times m$ γραμμικό σύστημα που προκύπτει από την διακριτοποίηση της εξίσωσης Laplace με τις μεθόδους διακριτοποίησης ΠΔ και ΠΟ. Ακολουθεί ο κώδικας που επιλύει το μη γραμμικό $n \times m$ σύστημα με εφαρμογή της μεθόδου του Νεύτωνα.

Παραθέτουμε τον κώδικα σε Matlab που επιλύει το $n \times m$ γραμμικό σύστημα που προκύπτει από την διακριτοποίηση της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο διακριτοποίησης ΠΔ. Η αριθμητική λύση συγκρίνεται με την αναλυτική στην συνάρτηση function: `analytiki2b.m`.

Matlab Code: `trid nxm FD.m`

```
1  %-----  
2  % Solving the Laplace or Poisson equation with  
3  % three iterative methods, GM, CGM and GMRES for  
4  % n x m discretized systems (Finite Differences)  
5  %-----  
6  % Comparison with analytical solution (Laplace)  
7  % Starting date: 12/4/2017  
8  % Improvement date: 17/5/2017  
9  %-----  
10  
11 function main()  
12 clear all; clc;
```

```

13
14 %———— Question for solver to use
15 flag_sol = input('Provide a number for the solver, GM:
16             1, CGM: 2, GMRES: 3, :');
16 %———— Question for solver to use
17
18 % We solve n x m, initial problem n = 3, m = 2
19 n = 100;
20 m = 100;
21
22 dx = 1./(n+1)
23 dy = 1./(m+1)
24
25 % —— FD ——
26 beta = dy^2 / dx^2;
27
28 % —————
29
30 L1 = dx * (n+1);
31 L2 = dy * (m+1);
32
33 L = 1.0; Nx = dx; Ny = dy;
34
35 xd = linspace(0, L1, n+2);
36 yd = linspace(0, L2, m+2);
37
38 % —— create the grid ——
39 for i = 1 : m+2
40     for j = 1 : n+2
41         xdn(i, j) = xd(j);
42         ydn(i, j) = yd(i);
43     end
44 end
45 % —— create the grid ——
46
47 % —— analytical solution
48 [doubleUan_plot] = analytiki2b(xd, yd, L1, L2, Nx, Ny, n
49     , m);

```



```

50 % ----- start time -----
51 tic;
52
53 % ----- FD -----
54 T = full(gallery('tridiag', n, -beta, 2*(1 + beta), -
    beta));
55 I = eye(n);
56
57 % -----
58 % BLKTRIDIAG: computes a sparse (block) tridiagonal
    matrix with n blocks
59 A = blktridiag(T, -I, -I, m);
60 % -----
61
62 % The sparsity pattern is correct
63 spy(A)
64
65 % and the elements are as designated
66 full(A);
67
68 % We obtain the Cholesky
69 L1 = ichol(A); % use only 3-diagonal
70 %full(L1);
71
72 % -----
73 for i = 1 : n*m
74     if i <= n
75         b(i) = sin(pi*xd(i+1)/L);
76     else
77         b(i) = 0.0;
78     end
79     x(i) = 0.0;
80 end
81 % -----
82
83 % ----- parameters -----
84 restart = 1000;
85 tol      = 1.e-20;
86 maxit    = n*m;

```

```

87 % ----- parameters -----
88
89 % ----- GM - preconditioned
90 if flag_sol == 1
91 Ipr = eye(n*m);
92 % ----- Quarteroni (see code "gradient")
93 [x_sol, error, k, flag] = gradient(A, x', b', Ipr, maxit
    , tol);
94 % ----- GM - preconditioned
95
96 % ----- CGM - preconditioned
97 elseif flag_sol == 2
98 % ----- Quarteroni (see code "conjgrad")
99 %[x_sol, error, niterGM, flag] = conjgrad(A1, x1, b1, I,
    maxit, tol);
100
101 % ----- Matlab code - preconditioned
102 [x_sol, flag, relres, k] = pcg(A, b', tol, maxit,
    L1, L1');
103
104 [x_sol, flag, relres, k] = pcg(A, b', tol, maxit);
    % Matlab code
105 % ----- CGM - preconditioned
106
107 % ----- GMRES
108 else
109 % ----- Quarteroni (see code "gmres")
110 [x_sol, k] = gmres_quart(A, b', m, tol, x');
111
112 [x_sol, flag, relres, k] = gmres(A, b', restart, tol,
    maxit); % Matlab code
113 % ----- GMRES
114 end
115 % ----- stop time -----
116 toc
117 k % number of iterations
118
119 % ----- Figures for solution
120 u = zeros(m+2, n+2);

```

```

121
122     for i = 1 : m
123         for j = 1 : n
124             u(i+1, j+1) = x_sol((i-1) * n + j);
125         end
126     end
127
128 % ----- Boundary conditions
129 % -----> y - boundary
130     for i = 1 : m+2
131         u(i,1) = 0.0;
132         u(i,n+2) = 0.0;
133     end
134
135 % -----> x - boundary
136     for i = 1 : n+2
137         u(1, i) = sin(pi * xd(i)/L);
138         u(m+2,i) = 0.0;
139     end
140 % ----- Boundary conditions
141
142 % ----- Norms
143     diff = abs(doubleUan_plot - u);
144
145 % -----> Euclidean Norm -----
146     Eucl_norm = 0.0;
147
148     for i = 1 : m+2
149         for j = 1 : n+2
150             Eucl_norm = Eucl_norm + (doubleUan_plot(i, j)
151                 - u(i, j))^2;
152         end
153     end
154
155     Eucl_Norm = sqrt(Eucl_norm)
156
157 % -----> Infinite Norm -----
158     Umax1 = max(diff);
159     Umax = max(Umax1);

```

```

159
160     Infinite_Norm = double(Umax)
161
162 %———— Norms
163
164 %———— Graphics section —————
165 figure
166     hold on
167     Umin = min(x_sol);
168     Umax = max(x_sol);
169
170     contourf(xd, yd, u, 10)
171     shading flat
172     axis equal
173 %———— plotting the grid —————
174     for i = 1 : m+2
175         for L = 2 : n+2
176             line([xdn(i,L) xdn(i,L-1)], [ydn(i,L) ydn(i,L
177                 -1)], [0 0], 'LineStyle', '-', 'Color', [0 0
178                 0])
179         end
180     end
181
182     for i = 2 : m+2
183         for L = 1 : n+2
184             line([xdn(i,L) xdn(i-1,L)], [ydn(i,L) ydn(i
185                 -1,L)], [0 0], 'LineStyle', '-', 'Color', [0 0
186                 0])
187         end
188     end
189
190     for i = 1 : m+2
191         for j = 1 : n+2
192             plot(xdn(i,j), ydn(i,j), '--ks', '
                LineWidth', 1, ...
                'MarkerEdgeColor', 'w', ...
                'MarkerFaceColor', 'w', ...
                'MarkerSize', 1)
193         end

```

```
193         end
194 %———— plotting the grid —————
195     caxis([Umin, Umax]);
196     title('Numerical solution')
197     colorbar;
198     hold off
199 %—— end of code ——
```

Ο κώδικας σε Matlab που περιγράφει την αναλυτική λύση.

Matlab Code: analytiki2b.m

```
1  %-----
2  % Analytical solution for Laplace
3  %  $u_{xx} + u_{yy} = 0$ ,  $x$  στο  $[0,1]$ 
4  % -----
5  % Boundary conditions:
6  %  $u(x,0) = u(0,y) = u(1,y)=0$ ,
7  % and  $u(x,1) = \sin(\pi*x/L)$ ,  $L = 1$ 
8  %-----
9
10 function [doubleUan_plot] = analytiki2(X, Y, L1, L2, Nx,
    Ny, n, m)
11
12 Uan_plot = zeros(m+2, n+2);
13
14 x = sym('x');
15 y = sym('y');
16
17 a_nplot = double ( (1/(L1 * sinh(pi))) * int((sin(pi*
    x/L1)).^2, 0, L1) );
18
19 for i = 1 : m+2
20     for j = 1 : n+2
21         Uan_plot(i,j) = 2*(a_nplot*sinh(pi*(1-Y(i))/L2))
            .* sin(pi*X(j)/L1);
22     end
23 end
24
25 doubleUan_plot = double(Uan_plot);
26 %----- end of function -----
```

Παραθέτουμε τον κώδικα σε Matlab που επιλύει το $n \times m$ γραμμικό σύστημα που προκύπτει από την διακριτοποίηση της εξίσωσης Laplace με τη μέθοδο διακριτοποίησης ΠΟ. Η αριθμητική λύση συγκρίνεται με την αναλυτική στην συνάρτηση function: analytiki2b.m.

Matlab Code: trid nxm FV

```

1  %-----
2  % Solving the Laplace or Poisson equation with
3  % three iterative methods, GM, CGM and GMRES for
4  % n x m discretized systems (Finite Volumes)
5  %-----
6  % Comparison with analytical solution (Laplace)
7  % Starting date: 12/4/2017
8  % Improvement date: 17/5/2017
9  %-----
10
11 function main()
12 clear all; clc;
13
14 %----- Question for solver to use
15 flag_sol = input('Provide a number for the solver, GM:
16                 1, CGM: 2, GMRES: 3, :');
17 %----- Question for solver to use
18
19 % We solve n x m, initial problem n = 3, m = 2
20 n = 100;
21 m = 100;
22
23 dx = 1./(n+1);
24 dy = 1./(m+1);
25
26 % ----- FV -----
27 beta = dy / dx;
28
29 %-----
30 L = 1.0; Nx = dx; Ny = dy;

```

```

31 L1 = dx * (n+1);
32 L2 = dy * (m+1);
33
34 L = 1.0; Nx = dx; Ny = dy;
35
36 xd = linspace(0, L1, n+2);
37 yd = linspace(0, L2, m+2);
38 % -----
39
40 % ----- create the grid -----
41 for i = 1 : m+2
42     for j = 1 : n+2
43         xdn(i, j) = xd(j);
44         ydn(i, j) = yd(i);
45     end
46 end
47 % ----- create the grid -----
48
49 %----- analytical solution
50 [doubleUan_plot] = analytiki2b(xd, yd, L1, L2, Nx, Ny, n
    , m);
51
52 % ----- start time -----
53 tic;
54
55 % ----- FV -----
56 T = full(gallery('tridiag', n, - beta^2, 2*(beta^2 + 1),
    - beta^2));
57
58 I = eye(n);
59
60 % -----
61 % BLKTRIDIAG: computes a sparse (block) tridiagonal
    matrix with n blocks
62 A = blktridiag(T, -I, -I, m);
63 % -----
64
65 % The sparsity pattern is correct
66 spy(A);

```



```

67
68 % and the elements are as designated
69 %full(A);
70
71 % We obtain the Cholesky
72 L1 = ichol(A); % use only 3-diagonal
73 %full(L1);
74
75 % -----
76 for i = 1 : n * m
77     if i <= n
78         b(i) = sin(pi*xd(i+1)/L);
79     else
80         b(i) = 0.0;
81     end
82     x(i) = 0.0;
83 end
84 % -----
85
86 % ----- parameters -----
87 restart = 1000;
88 tol      = 1.e-20;
89 maxit    = n * m;
90 % ----- parameters -----
91
92 % ----- GM - preconditioned
93 if flag_sol == 1
94     Inxm = eye(n * m);
95
96 % ----- Quarteroni (see code "gradient")
97 [x_sol, error, k, flag] = gradient(A, x', b', Inxm,
98     maxit, tol);
99
100 % ----- CGM - preconditioned
101 elseif flag_sol == 2
102 % ----- Quarteroni (see code "conjgrad")
103 %[x_sol, error, niterGM, flag] = conjgrad(A1, x1, b1, I,
104     maxit, tol);

```

```

104
105 % —— Matlab code – preconditioned
106 %[x_sol, flag, relres, k] = pcg(A, b', tol, maxit,
    L1, L1');
107
108 [x_sol, flag, relres, k] = pcg(A, b', tol, maxit);
    % Matlab code
109 % —— CGM – preconditioned
110
111 % —— GMRES
112 else
113 % —— Quarteroni (see code "gmres")
114 %[x_sol, k] = gmres-quart(A, b', m, tol, x');
115
116 [x_sol, flag, relres, k] = gmres(A, b', restart, tol,
    maxit); % Matlab code
117 % —— GMRES
118 end
119 % —— stop time ——
120 toc
121 k % number of iterations
122
123 % —— Figures for solution
124 u = zeros(m+2, n+2);
125
126     for i = 1 : m
127         for j = 1 : n
128             u(i+1, j+1) = x_sol((i-1) * n + j);
129         end
130     end
131
132 % —— Boundary conditions
133 % ——> y – boundary
134     for i = 1 : m+2
135         u(i, 1) = 0.0;
136         u(i, n+2) = 0.0;
137     end
138
139 % ——> x – boundary

```

```

140     for i = 1 : n+2
141         u(1, i) = sin(pi * xd(i)/L);
142         u(m+2,i) = 0.0;
143     end
144 % ----- Boundary conditions
145
146 % ----- Norms
147     diff = abs(doubleUan_plot - u);
148
149 % -----> Euclidean Norm -----
150     Eucl_norm = 0.0;
151
152     for i = 1 : n+2
153         for j = 1 : n+2
154             Eucl_norm = Eucl_norm + (doubleUan_plot(i, j)
155                 - u(i, j))^2;
156         end
157     end
158
159     Eucl_Norm = sqrt(Eucl_norm)
160 % -----> Infinite Norm -----
161     Umax1 = max(diff);
162     Umax = max(Umax1);
163
164     Infinite_Norm = double(Umax)
165 % ----- Norms
166
167 % ----- Graphics section -----
168 figure
169     hold on
170     Umin = min(x_sol);
171     Umax = max(x_sol);
172
173     contourf(xd, yd, u, 10)
174     shading flat
175     axis equal
176     set(gca, 'xtick', [])
177     set(gca, 'ytick', [])

```

```
178         caxis([Umin, Umax]);
179         title('Numerical solution')
180         colorbar;
181         hold off
182 %—— end of code ——
```

Παραθέτουμε τον κώδικα σε Matlab που επιλύει το $n \times m$ μη γραμμικό σύστημα που προκύπτει από την διακριτοποίηση της εξίσωσης Poisson με τη μέθοδο διακριτοποίησης ΠΔ.

Matlab Code: trid nxm nonlinear Newton FD

```

1  %-----
2  % Solving the non-homogeneous Poisson equation:
3  %  $u_{xx} + u_{yy} = \text{kappa} * u^2$ 
4  % with three iterative methods, GM, CGM and GMRES
5  % for  $n \times m$  discretized systems
6  %-----
7  % Comparison with analytical solution (Laplace)
8  % Starting date: 12/4/2017
9  % Improvement date: 17/5/2017
10 % Improvement date for the nonlinear: 30/6/2017
11 %-----
12
13 function main()
14 clear all; clc;
15
16 %----- Question for solver to use
17 flag_sol = input('Provide a number for the solver, GM:
18                 1, CGM: 2, GMRES: 3, :');
19 %----- Question for solver to use
20
21 % We solve  $n \times m$ ,  $n > m$ , initial problem  $n = 3$ ,  $m = 2$ 
22 n = 10;
23 m = 10;
24
25 dx = 1/(n+1)
26 dy = 1/(m+1)
27
28 % ----- FD -----
29 beta = dy^2 / dx^2;
30 % use  $k = 1$ ,  $k = 8$ ,  $k = 18$ 
31 gamma = 1.0 * dy^2;

```

```

32 % -----
33 L = 1.0; Nx = dx; Ny = dy;
34
35 xd = linspace(0, L, n+2);
36 yd = linspace(0, L, m+2);
37
38 y_sol(1) = 10.0; iter = 0;
39 % -----
40
41 % -----
42 for i = 1 : n * m
43     x(i) = 0.0;
44 end
45
46 while abs(y_sol(1)) > 1.e-10
47     iter = iter + 1;
48
49 % ----- we write it in a matrix form from vector form
50     for i = 1 : m
51         for j = 1 : n
52             u(i+1, j+1) = x((i-1) * n + j);
53         end
54     end
55
56 % ----- Boundary conditions
57 % -----> y - boundary
58     for i = 1 : m+2
59         u(i,1) = 0.0;
60         u(i,n+2) = 0.0;
61     end
62
63 % -----> x - boundary
64     for i = 1 : n+2
65         u(1, i) = sin(pi * xd(i)/L);
66         u(m+2,i) = 0.0;
67     end
68 % ----- Boundary conditions
69
70 % ----- we write it in a matrix form from vector form

```

```

71 for i = 1 : m
72     for j = 1 : n
73
74         b((i-1) * n + j) = (2*(beta + 1) - gamma * u(i
75             +1, j+1)) * u(i+1, j+1) ...
76             - beta * u(i+1, j+2) - beta * u(i+1, j)
77             ...
78             - u(i+2, j+1) - u(i, j+1);
79     end
80 end
81 % We assign for the Newton method b = - b
82 b = - b;
83 % -----
84 % ----- parameters -----
85 restart = 10000;
86 tol      = 1.e-6;
87 maxit    = n * m;
88 ernlsum  = 10.0;
89 iternl   = 0;
90 % ----- parameters -----
91
92 % ----- FD -----
93 T = full(gallery('tridiag', n, -beta, 2*(beta + 1/beta),
94     -beta));
95
96 I      = eye(n);
97 Inxm   = eye(n * m);
98
99 % -----
100 % BLKTRIDIAG: computes a sparse (block) tridiagonal
101 % matrix with n blocks
102 A = blktridiag(T, -I, -I, m);
103
104 IX = - 2 * gamma * diag(x);
105
106 A = A + IX;

```

```

105
106 %% The sparsity pattern is correct
107 % spy(A)
108
109 %% and the elements are as designated
110 % full(A)
111
112 % We obtain the Cholesky
113 % L1 = ichol(A); % use only 3-diagonal
114 % full(L1);
115
116 % ----- GM - preconditioned
117 if flag_sol == 1
118 % ----- Quarteroni (see code "gradient")
119 [y_sol, error, k, flag] = gradient(A, x', b', Inxm,
    maxit, tol);
120 % ----- GM - preconditioned
121
122 % ----- CGM - preconditioned
123 elseif flag_sol == 2
124 % ----- Quarteroni (see code "conjgrad")
125 %[y_sol, error, niterGM, flag] = conjgrad(A1, x1, b1, I,
    maxit, tol);
126
127 % ----- Matlab code - preconditioned
128
129 % ----- we modify for the Newton method
130 [y_sol, flag, relres, k] = pcg(A, b', tol, maxit);
    % Matlab code
131 % ----- CGM - preconditioned
132
133 % ----- GMRES
134 else
135 % ----- Quarteroni (see code "gmres")
136 %[x_sol, k] = gmres-quart(A, b', m, tol, x');
137
138 [y_sol, flag, relres, k] = gmres(A, b', restart, tol,
    maxit); % Matlab code
139 % ----- GMRES

```



```

140 end
141 x = x + y_sol';
142
143 k % number of internal iterations (SD, CGM, GMRES)
144 end
145
146 y_sol_max = max(y_sol)
147
148 iter % number of external iterations (Newton)
149
150 % ----- Figures for solution
151 u = zeros(m+2, n+2);
152     for i = 1 : m
153         for j = 1 : n
154             u(i+1, j+1) = x((i-1) * n + j);
155         end
156     end
157
158 % ----- Boundary conditions
159 % -----> y - boundary
160     for i = 1 : m+2
161         u(i, 1) = 0.0;
162         u(i, n+2) = 0.0;
163     end
164
165 % -----> x - boundary
166     for i = 1 : n+2
167         u(1, i) = sin(pi * xd(i)/L);
168         u(m+2, i) = 0.0;
169     end
170 % ----- Boundary conditions
171
172 % ----- Graphics section -----
173 figure
174     hold on
175     Umin = min(x);
176     Umax = max(x);
177
178     contourf(u, 10)

```

```
179     shading flat
180     axis equal
181     set(gca, 'xtick', [])
182     set(gca, 'ytick', [])
183     caxis([Umin, Umax]);
184     title('Numerical solution')
185     colorbar;
186     hold off
187 % —— end of code ——
```